

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

رقم الترتيب: .....

رقم التسلسل: .....

جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي  
كلية العلوم الدقيقة  
قسم الفيزياء

مذكرة تخرج مقدمة لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاعات و طاقة



من إعداد:

عوادي الخنساء

الموضوع

الكميات الترموديناميكية لنموذج ايزينغ

نوقشت يوم: 2019/06/20

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة:

رئيسا  
مناقشا  
مؤطرا

أستاذ مساعد أ  
أستاذ مساعد أ  
أستاذ محاضر ب

عسكري سهيلة  
بسر الزوبير  
احميم رشيد

الموسم الجامعي: 2019/2018

# اللهم

أهدي هذا العمل إلى روح والدي رحمه الله وخفر له

إلى والدي الكريمة بركاتك اللهم في جسدنا

إلى أختناي حنا وإيمان

إلى إخوتي عمي ويوسف وعبد الحادي

إلى حائلي وزملائي وأساقذني الكرام

الغناء

# الشكر و العرفان

إن الحمد لله وحده لا شريك له الذي بنعمته تتم صالحات أعمالنا و هو الذي هدانا إلى الحق و الطريق المستقيم و علمنا ما لم نكن نعلمه فله الحمد حتى يرضى وله الحمد إذا رضي وله الحمد بعد الرضى.

ها نحن نصل الى ضوء آخر النفق، إلى خاتمة المشوار ونهاية المطاف، وعندما نكون عند عتبات مسك الختام يعجز اللسان عن الكلام، ولكن الواجب يقتضي أن ننزل الناس منازلهم و بمناسبة تخرجي هذا أتقدم بجزيل الشكر و الامتنان لأستاذي الفاضل الدكتور **احميد رشيد** الذي مد يد العون لي و كان نعم الناصح و المرشد طوال هذا العمل كما أتقدم بالشكر للأستاذة المحترمة **عسكري سهيلة** رئيسة و الأستاذة المحترمة **بسر الزبير** مناقشا على قبولهما مناقشة و تقييم عملي هذا، و إلى كل من قدم العون من بعيد أو قريب.

الجنساء

فهرس المحتويات

I	..... قائمة الأشكال
II	..... قائمة الجداول
III	..... قائمة الترميزات
V	..... قائمة المصطلحات العلمية
	المقدمة العامة

**الفصل الأول: مفاهيم عامة حول الانتقالات الطورية**

11	..... 1.1 تصنيف الانتقالات الطورية
11	..... 1.1.1 تصنيف أرنفست
12	..... 2.1.1 تصنيف لاندאו
14	..... 2.1 أنواع الإنتقالات الطورية
14	..... 1.2.1 انتقال من الدرجة الأولى
16	..... 2.2.1 انتقال من الدرجة الثانية
16	..... 1.2.2.1 كسر التناظر التلقائي
17	..... 3.1 وسيط الترتيب
18	..... 4.1 العالمية
18	..... 5.1 الأسس الحرجة
20	..... 6.1 تقريب الحقل المتوسط
20	..... 1.6.1 صلاحية الحقل المتوسط

**الفصل الثاني: المجموعة القانونية و الكميات الترموديناميكية**

22	..... 1.2 قوانين الترموديناميك
22	..... 1.1.2 القانون الصفري
22	..... 2.1.2 القانون الأول

23	3.1.2 القانون الثاني
24	4.1.2 القانون الثالث
25	2.2 المجموعة القانونية الصغرى
25	3.2 المجموعة القانونية
27	4.2 حساب الكميات الترموديناميكية
27	1.4.2 الطاقة الداخلية
28	2.4.2 الضغط
29	3.4.2 الأنتروبي
30	4.4.2 الطاقة الحرة
30	5.4.2 الكمون الكيميائي
31	6.4.2 السعة الحرارية
32	7.4.2 المغنطة
32	5.2 تطبيقات المجموعة القانونية
32	1.5.2 البارامغناطيسية
<b>الفصل الثالث: دراسة عددية لبعض الكميات الترموديناميكية</b>	
36	1.3 الوصف النظري لنموذج ايزينغ
40	2.3 نموذج ايزينغ و الانتقالات الطورية
41	3.3 تقريب الحقل المتوسط
42	4.3 خوارزمية متروبوليس
43	5.3 مناقشة النتائج العددية
47	الخلاصة العامة
49	قائمة المراجع

## قائمة الأشكال

- الشكل(1.1): منحنى يوضح المتغيرات الشدية  $(p, T)$  ..... 11
- الشكل(2.1): يوضح الاختلافات التخطيطية بين وسيطي الترتيب كدالة لدرجة الحرارة ..... 12
- الشكل(3.1): يوضح بعض الميزات الهامة للانتقال في تكثيف غاز\_ سائل ..... 13
- الشكل(4.1): مخطط توجه السينات عند درجات حرارة مختلفة ..... 14
- الشكل(5.1): منحنى التلاكؤ النموذجي ..... 15
- الشكل(6.1): مخطط الانتقال الطوري ..... 16
- الشكل(7.1): السلوك النوعي للمغطة ..... 16
- الشكل(8.1): مخطط توضيحي لوسيط الترتيب ..... 17
- الشكل(1.3): منحنى المغطة ..... 43
- الشكل(2.3): منحنى الطاقة ..... 44
- الشكل(3.3): منحنى السعة الحرارية ..... 44
- الشكل(4.3): منحنى الحساسية ..... 45

قائمة الجداول

- جدول 1.1 : الأسس الحرجة للانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي ..... 19
- جدول 2.1 : الأسس الحرجة للانتقال سائل-غاز ..... 19
- جدول 1.2 : قيم الطاقة و المغنطة لنموذج ايزينغ أحادي البعد بـ (FE) و (PBC) مع 2 سبين ... 38
- جدول 2.3 : قيم الانحلال، الطاقة و المغنطة لنموذج ايزينغ أحادي البعد بـ (FE) و (PBC)  
مع 2 سبين ..... 39

الرموز باللاتينية :

الحقل المغناطيسي	$B$
الحقل القسري	$B_C$
السعة الحرارية	$C_V$
طاقة النظام	$E_r$
طاقة الخزان	$E_T$
الطاقة الحرة	$F$
الكمون الترموديناميكي	$G$
معامل الإنحلال في المستوي	$g_r$
الانتالبي	$H$
ثابت الإقتران	$J$
ثابت بولتزمان	$K_B$
الإنضغاطية الإيزوترمية	$K_T$
المغنطة	$M$
المغنطة المتبقية	$M_R$
مغنطة التشبع	$M_\infty$
إحتمال التوزيع	$\mathcal{P}$
كمية الحرارة	$Q$
الانتروبي	$S$
درجة الحرارة الحرجة	$T_C$
الطاقة الداخلية	$U$
العمل المبذول	$W$

الرموز باليونانية:

الحساسية المغناطيسية	$\chi$
----------------------	--------

الكمون الكيميائي	$\mu$
كثافة الماء	$\rho_l$
كثافة الغاز	$\rho_g$
مقلوب درجة الحرارة	$\beta$
طول الإرتباط	$\xi$
العدد الكلي لحالات النظام ذات الطاقة $E$	$\Omega(T)$

**المختصرات:**

النهايات الحرة	(FE)
الشروط الحدية الدورية	(PBC)

قائمة المصطلحات العلمية

English	العربية
Phase transition	الانتقال الطوري
Broken symmetry	كسر التناظر
Order paramater	وسيط الترتيب
Critical point	النقطة الحرجة
Ferromagnetic	الفيرومغناطيسية
Paramagnetic	البارامغناطيسية
Universality	العالمية
Mean filed approximation	تقريب الحقل المتوسط
Critical exponents	الأسس الحرجة
Phenomenon of hysteresis	ظاهرة التلاكو
The partition function	دالة التوزيع
Fluctuations	التأرجحات
The chemical potential	الكمون الكيميائي
Free ends	النهايات الحرة
Periodic boundary conditions	الشروط الحدية الدورية
Metropolis algorithm	خوارزمية متروبوليس

# المقدمة العامة

## المقدمة العامة

الانتقالات الطورية هي واحدة من تلك الظواهر التي نجدها في كل مجال في الفيزياء، تحتوي على كم هائل من الظواهر الفيزيائية [1]، الانتقالات الطورية المعروفة لدى الكثيرين هي تحولات المادة بين أشكالها الأربعة الصلبة و السائلة و الغازية و البلازما، هناك نوعان أساسيان من الانتقالات الطورية انتقال طوري من الدرجة الأولى و يكون فيه الانتقال من طور إلى آخر بشكل غير مستمر، و يحدث الانتقال تحت تأثير تغيير خارجي و النوع الثاني و الأهم هو الانتقال الطوري من الدرجة الثانية، و هو انتقال مستمر، و يحدث تحت تأثير القوى الداخلية للجلمة، و أغلب الانتقالات التي تحدث في الطبيعة هي من النوع الثاني [2,3].

الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية، و التي تسمى أيضا الانتقالات الطورية المستمرة تتميز بستة أسس حرجة تتحكم في تصرف الكميات الترموديناميكية مثل المغنطة و السعة الحرارية و الطاقة الداخلية عند درجة الحرارة الحرجة  $T_c$ ، هذه الأسس الحرجة تحقق فيما بينها علاقات التدرج و بالتالي فإن إثنين منهما فقط مستقلين خطيا [4] الأهم من هذا خاصية العالمية التي تحققها هذه الأسس و التي تنص بكل بساطة على ان هذه الأسس لا تتعلق إلا بالبعد الذي يحدث فيه الانتقال الطوري و تناظرات النظام و لا تتعلق إطلاقا بأي تفاصيل أخرى للانتقال الطوري أي أن جميع الانتقالات الطورية في البعد الثالث مثلا لها نفس الأسس الحرجة [5,6].

حقيقة الوصف النظري للانتقالات الطورية صعب جدا لذلك القليل من النماذج يمكن معالجتها في إطار الفيزياء الإحصائية بدون استعمال الحلول العددية [7,8]. أحد أهم هذه النماذج هو نموذج ايزينغ و هو نموذج اقترحه لنز على تلميذه ايزينغ من أجل دراسة الانتقال من او نحو الفيرومغناطيسية الذي نشاهده في كثير من المعادن عند تغيير درجة الحرارة، هذا النموذج يمكن ان يوجد في أي بعد [9]، في بعد واحد الحل قدمه ايزينغ نفسه في رسالة الدكتوراه، في بعدين الحل معقد جدا قدمه اونساجر الذي حصل عليه على نوبل [10,11]، النموذج في البعد الرابع أو أكثر يصبح اضطرابي و حله سهل جدا يعطى بنظرية الحقل المتوسط [4].

البعد الثالث الذي هو أهم الأبعاد على الإطلاق والذي تتواجد فيه الأغلبية الساحقة من الإنتقالات الطورية من الدرجة الثانية الموجودة في الطبيعة، يبقى نموذج ايزينغ في هذا البعد غير محلول و هذا ليس من قلة الأذكياء الذين حاولوا جدهم في إيجاد الحل [12,13] فقد بدأ الباحثون في محاولات مكثفة لحل النموذج من أجل شبكات ذات أبعاد عليا ففي سنة 1936 بين بيارلس أن نموذج ايزينغ يبدي خصائص فيرومغناطيسية عند درجات حرارة منخفضة في أبعاد عليا في حين تختفي هذه الخصائص في حالة بعد واحد عند درجات حرارة منخفضة بما فيه الكفاية [7,4]، و بمحاولة من كرامرس و وانير سنة 1941 اكتشفا طريقة جيدة لحل النموذج و التي مكنتهما من التحقق من النتائج الأولى للنموذج في حالة بعدين و ذلك من خلال حساب درجة حرارة كوري للنموذج [10,1].

في السبعينيات استخدم و جنافلاسز و بيك لوصف ظاهرة إنتقال الأيونات للانتقالات من حالة (*low spin*) إلى حالة (*high spin*) في الجزيئات، و تمت تسميته باسم نموذج النوع هذا الأخير يمكن حله في بعد واحد فقط بينما تتم دراسته عدديا في بعدين و ثلاثة أبعاد [14,15].

من بين تقنيات المحاكاة تعد طريقة مونتّي كارلو هي الأكثر استخداماً، وهي منمنجة لإجراء حساب الكميات الترموديناميكية للنماذج الفيزيائية على وجه الخصوص، يتم استخدامها على نطاق واسع في دراسة الظواهر الحرجة و الانتقالات الطورية و تحليل النتائج التي تم الحصول عليها [14].

هدفنا من هذه المذكرة هو حساب بعض الكميات الترموديناميكية من خلال الدراسة العددية لنموذج ايزينغ و كان هذا متضمن في ثلاثة فصول :

تم تخصيص الفصل الأول لدراسة المفاهيم العامة حول الانتقالات الطورية كوسيط الترتيب و الأسس الحرجة و العالمية بالإضافة إلى أنواعها و معايير تصنيفها.

الفصل الثاني يتضمن قوانين الترموديناميك و بالإضافة إلى دراسة مفصلة للمجموعة القانونية و تعريف دالة التوزيع و علاقتها بالكميات الترموديناميكية.

الفصل الثالث يتضمن الدراسة العددية لبعض الكميات الترموديناميكية لنموذج ايزينغ في بعدين و ذلك بالاعتماد على الحسابات العددية من خلال خوارزمية متروبوليس و مونتّي كارلو.

# الفصل الأول

مفاهيم عامة حول الانتقالات  
الطورية

**1. مقدمة:**

الانتقال الطوري هو تغيير مفاجئ و غير مستمر في خصائص النظام [1] يعتبر هذا المجال معقد و لكنه مهم جدا لفهم الانتقالات التي تواجهها في الحياة اليومية و لدراسة الانظمة الإحصائية [5] سنقدم في هذا الفصل تصنيف الانتقالات الطورية و أنواعها بالإضافة إلى بعض المفاهيم الأساسية حولها كوسيط الترتيب و الأسس الحرجة و العالمية مع تقادي الاثباتات و التعقيدات الرياضية و كذلك تقريب الحقل المتوسط و صلاحيته .

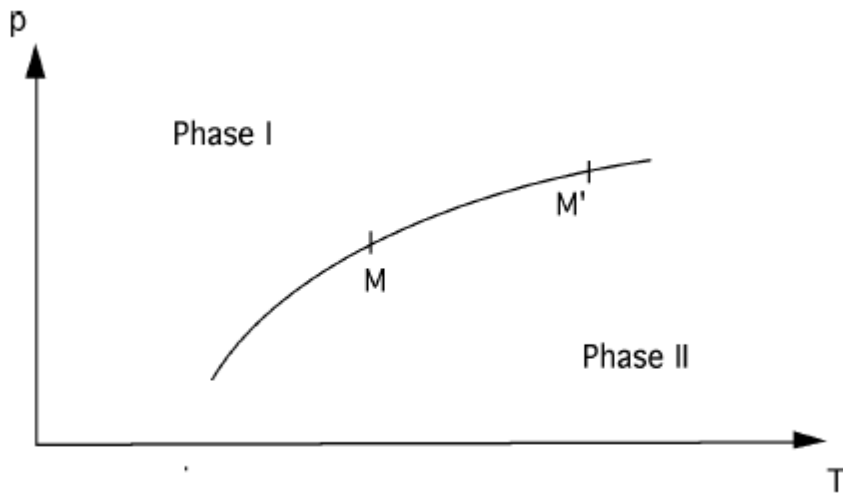
**1.1 تصنيف الانتقالات الطورية:**

هناك العديد من التصنيفات للانتقالات الطورية تؤدي إلى نفس الرتبة في أغلب الحالات ومع ذلك هناك بعض الاختلافات أحيانا، سنتطرق لتقديم بعض الأفكار حول هذا، كتحليل انفرادية الكمون الترموديناميكي، و كذلك فكرة كسر التناظر التلقائي [2,16].

**1.1.1 تصنيف أرنفست :**

اعتمادا على الكمون الترموديناميكي  $G = U - Ts + pV$  إقترح العالم أرنفست تسمية الانتقال من الدرجة الأولى الانتقالات المصحوبة بعدم الاستمرارية في الكميات الترموديناميكية مثل الأنتروبي، و التي تتعلق بالمشتقات الأولى للكمون الترموديناميكي و الانتقال من الدرجة الثانية الانتقالات المصحوبة بعدم الاستمرارية (القطع) في الكميات الترموديناميكية مثل الحرارة النوعية و التي تتعلق بالمشتقات الثانية للكمون الترموديناميكي بينما تبقى المشتقات الأولى مستمرة [16,17].

بشكل عام إذا كانت جميع المشتقات من الرتبة  $n - 1$  مستمرة و المشتق من الرتبة  $n$  غير مستمر فإن الانتقال سيكون من الرتبة  $n$  [2].



الشكل(1.1): منحنى يوضح المتغيرات الشدية  $(p, T)$  [2]

في هذا المخطط يقسم خط الانتقال إلى طورين  $I$  و  $II$  في كل نقطة من هذا المنحنى يمكن كتابة شرط ضمان التوازن بـ :

$$G_I(p, T) = G_{II}(p, T) \quad (1.1)$$

حيث  $G_I$  و  $G_{II}$  هم الكمونين الترموديناميين للطورين على الترتيب.

حتى لو كان هذا التعريف لترتيب الانتقال قديما إلا انه ذو فائدة لأنه يركز على الخصائص الترموديناميكية للنظام [6,5].

### 2.1.1 تصنيف لاندائو :

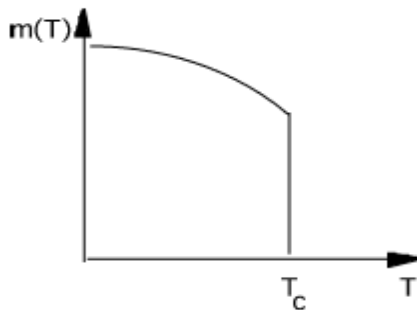
إن خصائص التناظر هي أصل التصنيفات التي إقترحها لاندائو سنة 1937 لاحظ لاندائو أن الانتقال من طور إلى طور دون حرارة كامنة مصحوبا بكسر التناظر [2,18].

إن طور درجة الحرارة المنخفضة أي مع بعض الاستثناءات هو أقل طور ترتيبيا و بالتالي الطور المرتب أقل تناظر من طور درجة الحرارة العالية نستطيع القول أن النظام فقد عنصر او عدة عناصر للتناظر أثناء الانتقال، لا يمكن وصف الطور المرتب الأقل تناظر من طور درجة الحرارة العالية بنفس المتغيرات بل يجب إدخال متغير إضافي لوصف الطور الأقل تناظرا بشكل كامل [18].

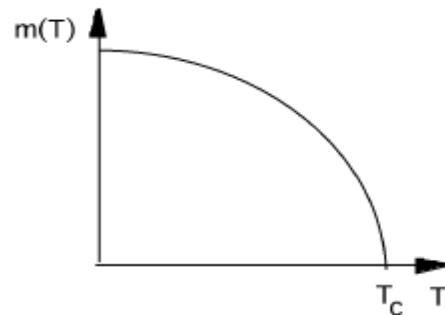
يجب ان يصف هذا المتغير الإضافي في نفس الوقت كسر التناظر و درجة الترتيب المكتسبة من قبل النظام، من الواضح ان هذا المتغير يجب ان يكون صفر في الطور المتناظر أي طور درجة الحرارة العالية و مختلف عن الصفر في الطور المرتب هذا المتغير مرتبط بتغيرات التناظر الناتجة عن الانتقال، سماه لاندائو بوسيط الترتيب [5,2].

من مفهوم وسيط الترتيب يمكن تصنيف الانتقالات الطورية إلى نوعين [5]:

- انتقال طوري من الدرجة الأولى.
- انتقال طوري من الدرجة الثانية.



انتقال طوري من الدرجة الأولى



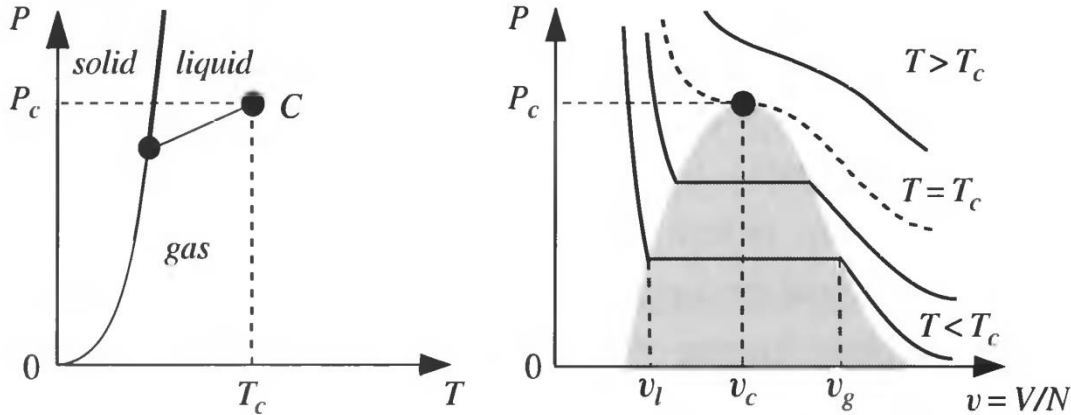
انتقال طوري من الدرجة الثانية

الشكل (2.1): يوضح الاختلافات التخطيطية بين وسيطي الترتيب كدالة لدرجة حرارة [2].

## 2.1 أنواع الانتقالات الطورية :

### 1.2.1 انتقال من الدرجة الأولى :

لتوضيح فكرة الانتقال الطوري من الدرجة الأولى سنقتصر على الانتقال من الطور الغازي إلى الطور السائل ( ظاهرة التكثيف ) .



الشكل (3.1): يوضح بعض الميزات الهامة للانتقال في تكثيف غاز - سائل [19].

- في منحنى (, T) يحدث انتقال طور على طول خط ينتهي عند النقطة (T<sub>c</sub>, P<sub>c</sub>)
- في المنحنى (P, v) يظهر الانتقال كفترة تعايش تقابل خليط من الغاز و السائل للكثافات ρ<sub>g</sub> و ρ<sub>l</sub> عند T < T<sub>c</sub>.
- نتيجة لانتهاء خط التعايش يمكن الانتقال من الطور الغازي الى الطور السائل باستمرار (بدون انتقال طوري) عن طريق الدوران حول النقطة الحرجة و بالتالي لا توجد فروق في الأطوار.
- الاختلاف بين كثافات الأطوار السائلة و الغازية تختفي عند الاقتراب من T<sub>c</sub>  
 $\rho_{liquid} \rightarrow \rho_{gas}$  مثل :  $T \rightarrow T_c$
- الضغط المقابل للحجم الإيزوثيرمي يصبح تدريجيا أكثر استواءا عند الاقتراب من T<sub>c</sub> من جانب درجة الحرارة المرتفعة هذا يعني أن الانضغاطية الإيزوثيرمية :  
 $K_T = -\frac{\partial v}{\partial P} \Big|_T / V$  تتباعد عن T<sub>c</sub><sup>+</sup>.
- يمكن التفريق بين الطورين على طول خط التعايش الغاز-السائل ρ<sub>g</sub> و ρ<sub>l</sub> الفرق بينهما من كثافة النقطة الحرجة ρ<sub>c</sub> - ρ<sub>l</sub> و ρ<sub>l</sub> - ρ<sub>c</sub> يمكن ان تكون بمثابة وسيط الترتيب [19,6,5].

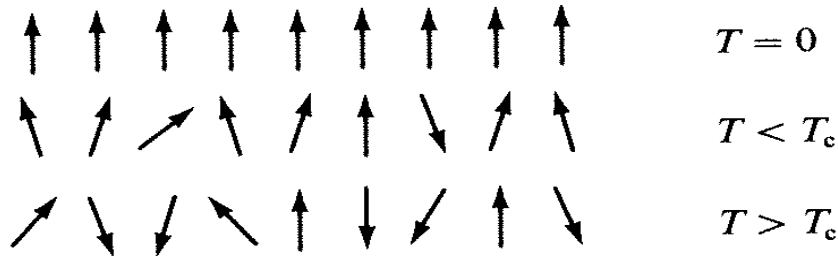
### 2.2.1 انتقال من الدرجة الثانية:

يعتبر الانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي المثال الأكثر شيوعاً للانتقالات الطورية من الدرجة الثانية والتي تسمى أيضاً بالظواهر الحرجة، تعد الفيرومغناطيسية ظاهرة شديدة التعقيد و المتغيرات التي تؤثر فيها متعددة [20,7] يمكن تمغنط بعض المواد مثل الحديد، النيكل و الكوبالت و غيرها في درجة حرارة الغرفة هذا يعني ان الإلكترونات الموجودة في المدارات غير المكتملة لديها فعليا سبينات متجهة في نفس الاتجاه تمكننا على الحصول على مغنطة تلقائية، و بما ان هناك عزم مغناطيسي مرافق لكل سبين فإن هذه المحاذاة تعني أن كل العزوم المغناطيسية تضاف منتجة مغناطيس ماكروسكوبي. [21]

عند تسخين المواد الفيرومغناطيسية فوق درجة حرارة معينة  $T_c$  من الرتبة  $10^3 K$  تدعى بدرجة حرارة كوري يلاحظ اختفاء مغنطة هذه المواد لتصبح مواد بارامغناطيسية. من السهل ان نتخيل بشكل حدسي أن ميل السبينات إلى المحاذاة نتيجة التفاعل بينها الذي يفضل هذا الترتيب، في درجات الحرارة العالية التحريض الحراري يميل إلى تدمير هذا التناظر مما يؤدي إلى اختفاء المغنطة، هذا التفسير لا يحتوي إلا على كل الحقيقة، في الواقع لقد كانت أحد المشاكل الأساسية للفيزياء الإحصائية لتثبت حقيقة الانتقال الطوري، لنكون دقيقين المناقشة التالية لا تنطبق على عينة فيرومغناطيسية كيفية بل على مجال واحد في مثل هذه العينة.

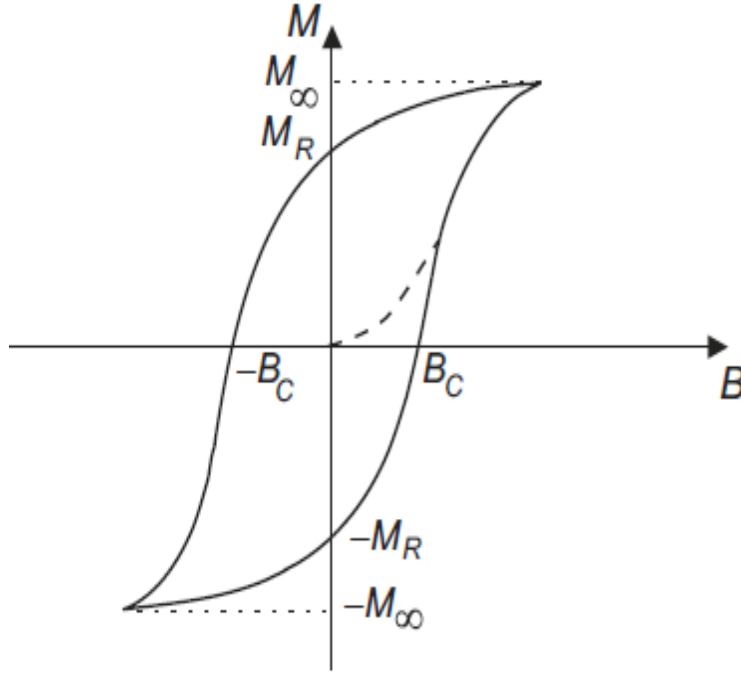
عند درجة حرارة أعلى من  $T_c$  لا يكون المجال ممغنطاً لكن عندما تكون درجة الحرارة أقل من  $T_c$  يصبح المجال ممغنطاً في حين أن المغنطة الكلية للعينة و التي تتكون من العديد من المجالات المختلفة يمكن أن تكون معدومة، مغنطة المجال  $M$  تزيد بإنخفاض درجة الحرارة حيث تأخذ قيمتها العظمى عند  $T = 0$  نتيجة لتوجه كل السبينات في نفس الاتجاه [22,7].

من اجل  $0 < T < T_c$  تفضل السبينات تميل إلى المحاذاة في نفس الاتجاه لكن التحريض الحراري لا يسمح إلا بمحاذاة جزء منها.



الشكل (4.1) : مخطط توجه السبينات عند درجات حرارة مختلفة [7]

الشكل التالي يوضح منحني التلاكؤ النموذجي أي المغنطة المتوسطة كدالة للحقل المغناطيسي  $B_0$

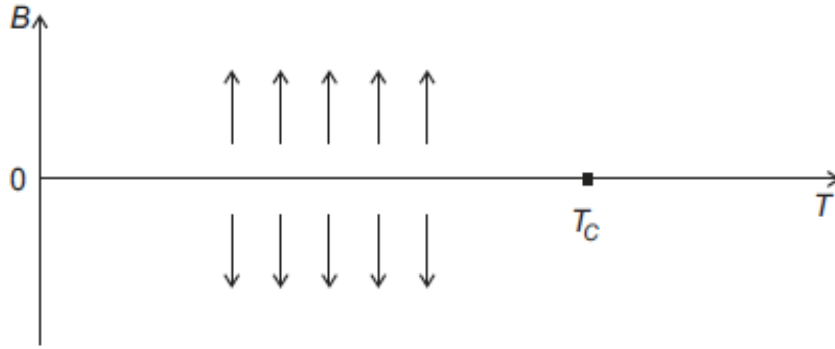


الشكل (5.1): منحنى التلاكؤ النموذجي [5]

إذا استمر الحقل المغناطيسي في الزيادة فسوف تزداد المغناطيسية ببطء حتى تصل إلى قيمة حدية  $M_{\infty}$  تسمى بمغطة التشبع بهذه العملية نصف ما يسمى بخط المغطة الأول، الآن إذا خفضنا الحقل المغناطيسي  $B$  فإن المغطة تقل و لكن لا تنعدم حتى عندما يكون الحقل الخارجي  $B = 0$  تاخذ القيمة  $M_R$  تنعدم المغطة عند تطبيق  $-B_C$  يسمى بالحقل القسري [20,7]، إذا قمنا بتخفيض الحقل المغناطيسي  $B$  باستمرار سنصل إلى مغطة التشبع  $-M_{\infty}$  و إذا زادت قيمة الحقل  $B$  حتى تنعدم فإن المغطة تكون قيمتها  $-M_R$  [5].

من المهم جدا ان نفهم ان المادة المغناطيسية لها تاريخ أي أن حالتها السابقة تؤثر على حاضرها و مستقبلها عند تطبيق حقل مغناطيسي [20,5]، على سبيل المثال لا يمكن قياس المغطة المتبقية إذا لم تكن العينة مشبعة في السابق لذلك من الممكن أن تشبع العينة فوق درجة الحرارة الحرجة  $T_C$  لجعلها لا تطبق أي حقل، عندما تنخفض درجة الحرارة أقل من  $T_C$  المغطة الكلية للعينة و التي تتكون من العديد من المجالات تقترب من الصفر [22,7]. و ينتج عن إزالة المغطة ان العينة المغناطيسية تنقسم إلى عدة مجالات من أجل تقليل طاقتها، هنا في الواقع من الافضل إنشاء مناطق في المادة لا يكون اتجاه المغطة متماثلا من أجل حصر خطوط التمويه المغناطيسي في الداخل قدر الإمكان للعينة و الذي يعدل مظهر منحنى التلاكؤ [20].

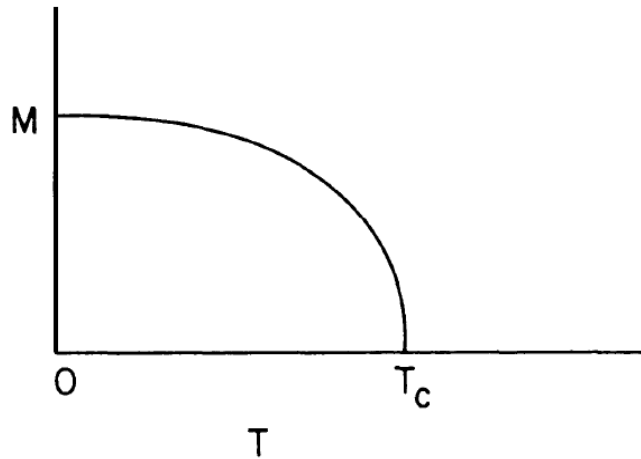
مخطط الانتقال الطوري لمادة فيرومغناطيسية هو أبسط منه لمائع لذا سنعطي مثال توضيحي كما يبين الشكل (6.1) حيث يمثل في المستوي المشكل من الحقل المغناطيسي  $B$  و درجة الحرارة  $T$  [23,5]



الشكل (6.1): مخطط الانتقال الطوري [23]

### 1.2.2.1 كسر التناظر التلقائي :

يوضح المنحنى البياني المبين في الشكل (7.1)  $M$  كدالة لدرجة حرارة، في غياب المجال المغناطيسي الخارجي تسمى  $M$  المغنطة التلقائية لأنها غير ناتجة عن تطبيق أي حقل، إن المغنطة التلقائية يجب أن تكون موجودة كظاهرة ملاحظة [7].



الشكل (7.1): السلوك النوعي للمغنطة [24]

من أجل  $T > T_c$  :

لا يمكن تحديد الاتجاه الفضائي المفضل في العينة الفيرومغناطيسية.

في المقابل من أجل  $T < T_c$  :

هناك اتجاه مفضل و هو اتجاه المغنطة، حالة المجال ليست لا متغايرة تحت كل الدورانات و لكن لا متغايرة فقط تحت الدورانات التي تتم حول المحاور التي تكون موازية لاتجاه المغنطة.

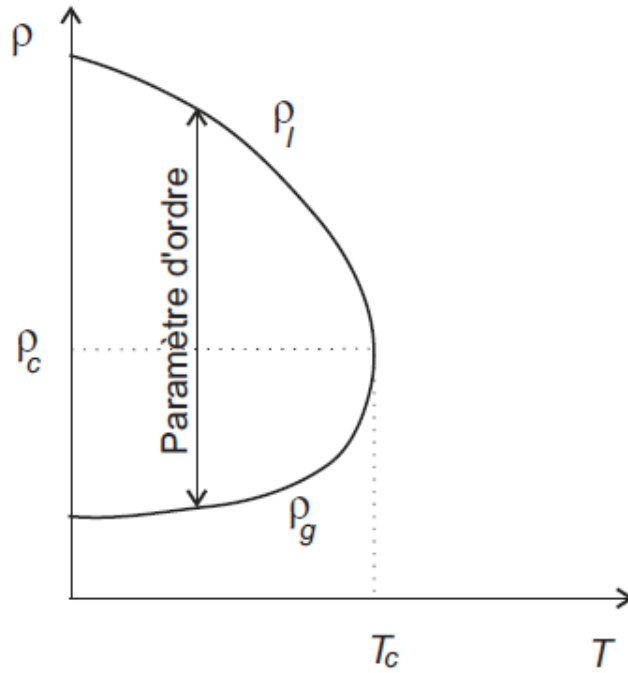
و تعرف هذه الظاهرة باسم كسر التناظر التلقائي، تسمى المغنطة المعدومة في طور درجة الحرارة العالية و مختلفة عن الصفر في طور درجة الحرارة المنخفضة بوسيط ترتيب الانتقال، نصادف ظاهرة كسر التناظر ومفهوم وسيط الترتيب غالبا في كل الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية [6,7].

### 3.1 وسيط الترتيب :

حسب التعريف هناك اكثر من طور متزن على خط التعايش، يعرف وسيط الترتيب على أنه دالة ترموديناميكية تختلف من طور لآخر و بالتالي يمكن استخدامه للتمييز بين هذه الأطوار [19]، يتم تحديد وسيط الترتيب لكل ظاهرة على حدا لأنه لا توجد طريقة عامة لتحديده، إذن سيأخذ أشكالا مختلفة حيث يكون عددا سلميا أو شعاعا أو كائن رياضي معقد جدا [5,1].

إن وسيط الترتيب يمثل سمة مميزة للانتقال الطوري و سنوضح هذا في بعض الأمثلة :

- بالنسبة للانتقال سائل-غاز فان وسيط الترتيب هو الفرق بين كثافتي السائل والغاز  $\rho_l - \rho_g$  في هذا النظام بالتحديد عند الانتقال من طور إلى آخر عند  $T < T_C$  يكون وسيط الترتيب معدوم و لا يمكن التمييز بين الطورين، في حين  $T > T_C$  وسيط الترتيب موجبا إذن وسيط الترتيب يعرف بعدد سلمي بعده  $n = 1$  [5,6,23].
- بالنسبة للانتقال الفيرومغناطيسي-البارمغناطيسي تعتبر المغنطة  $M$  وسيط الترتيب تنعدم المغنطة عند  $T < T_C$  و مختلفة عن الصفر عند  $T > T_C$  وسيط الترتيب لهذا الانتقال هو شعاع بعده  $n = 3$  [19,6].



الشكل (8.1): مخطط توضيحي لوسيط الترتيب [5]

### 4.1 العالمية :

الميزة المهمة للأسس الحرجة هي أنها لا تتعلق إلا بخصائص العامة للأنظمة ولا تتعلق بتفاصيل التفاعلات الحادثة فيها و هذا أيضا حتى بالنسبة للأنظمة التي لديها تفاعلات قصيرة المدى مثل السوائل و المواد الفيرومغناطيسية إن هذه الأسس الحرجة لا تتعلق إلا ببعد الفضاء للنظام و بعد وسيط الترتيب هي إذن كميات متميزة لوصف النظام في جوار النقطة الحرجة و كذلك لمعاينة صلاحية النماذج، فيقال أنها تخضع لقوانين عالمية لأنها تسمح بتعريف فئات تشمل انتقالات طورية تبدو للوهلة الأولى مختلفة تماما.

كتلخيص، هناك كميتان تسمح بتحديد تصرف النظام في جوار النقطة الحرجة هما بعد الفضاء  $d$  و بعد وسيط الترتيب  $n$ ، هذا الأخير قد يكون من الصعب تحديده لأسباب تجريبية أحيانا و نظرية أحيانا اخرى، و بالتالي كل زوج  $(d, n)$  يحدد فئة عالمية، جميع الأنظمة التي تنتمي إلى نفس الفئة لها سلوكات و أسس حرجة متماثلة، فعلى سبيل المثال من أجل  $d = 3$  و  $n = 1$  لدينا الانتقال سائل-غاز و الانتقال الفيرومغناطيسي احادي المحور (نموذج ايزينغ في ثلاثة أبعاد) [22,4,7]، بالإضافة إلى ذلك نلاحظ أن بين الأسس الحرجة علاقات بسيطة جدا من النوع  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$  تسمى بالقانون السلمي الذي لديه عالمية اكبر [2].

عالمية الأسس الحرجة في تقريب الحقل المتوسط هي المجموع، و قيمهم مستقلة عن النظام الفيزيائي المدروس [6] من الواضح أن البعد الفضائي  $d$  يلعب دورا مهما من خلال نموذج ايزينغ الذي نعرف حلوله الدقيقة في بعد و في بعدين و هذا يناقض العالمية القوية لتقريب الحقل المتوسط الذي لا يلعب فيه البعد الفضائي أي دور [10,11].

### 5.1 الأسس الحرجة :

في السنوات الاخيرة، أصبحت دراسة الظواهر الحرجة تركز أكثر فأكثر على الأسس الحرجة التي تصف السلوك بالقرب من النقطة الحرجة للكميات الفيزيائية [25].

سنبدأ بتعريف دقيق و عام للأس الحرج بالقرب من النقطة الحرجة لـ  $F(t)$

$$t = \frac{T-T_C}{T_C} = \frac{T}{T_C} - 1 \quad (2.1)$$

نفترض أن  $F(t)$  موجبة و مستمرة لقيم موجبة و صغيرة لـ  $t$ ، و أن الحد :

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\text{Ln} |F(t)|}{\text{Ln} |t|} \quad (3.1)$$

يسمى بالأس المرتبط بالدالة  $F(t)$ .

كدلالة مختصرة فإننا نشير إلى ان  $\lambda$  هي الأس الحرج لدالة  $F(t)$  بالكتابة :

$$F(t) \sim t^\lambda \quad (4.1)$$

هذه العلاقة تعني أن  $F(t)$  يتغير كـ  $|t|^\lambda$  لذلك نعطي الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي المبينة في الجدول (1.1) [23,5]

**الجدول (1.1):** الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي

$C_B \sim  t ^{-\alpha}$	السعة الحرارية ( $B=0$ )
$M \sim (-t)^{\beta^*}$	المغطة ( $B=0$ )
$\chi_T \sim  t ^{-\gamma}$	الحساسية الإيزوترمية ( $B=0$ )
$B \sim  M ^\delta$	الإيزوترمية الحرجة ( $t=0, B \rightarrow 0$ )
$\xi \sim  t ^{-\nu}$	طول الارتباط
$G(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$	دالة الارتباط لجسمين ( $t=0$ )

بنفس الطريقة نعطي الأسس الحرجة للانتقال سائل-غاز المبينة في الجدول (2.1) [23,5]

**الجدول (2.1):** الأسس الحرجة الأساسية للانتقال سائل-غاز

$C_V \sim  t ^{-\alpha}$	السعة الحرارية عند حجم ثابت
$\rho_l - \rho_g \sim  \rho_l - \rho_g ^\delta$	إيزومترية الحرجة ( $t=0$ )
$KT \sim  t ^{-\gamma}$	الإنضغاط الإيزومتري
$(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^{\beta^*}$	الفرق بين كثافتي السائل و الغاز
$\xi \sim  t ^{-\nu}$	طول الارتباط
$G(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$	دالة الارتباط الجسمين

## 6.1 تقريب الحقل المتوسط :

تستخدم نظريات الحقل المتوسط على نطاق واسع في العديد من مجالات الفيزياء. بالنسبة لنظام ذو الجسيمات  $N$ ، تتمثل الفكرة الأساسية في استبدال لكل واحد منهما، تفاعل الجسيمات الأخرى بواسطة كمون متوسط يسمى أيضا الحقل المتوسط الجزيئات و يطلق على هذا التقريب أيضا نموذج الجسيمات المستقل لان حركة كل منها يحكمها الكمون المتوسط و مع ذلك هناك اعتماد غير مباشر على الجسيمات الأخرى و ذلك لأن متوسط الكمون ينشأ من التفاعل بين جميع الجسيمات مثل هذا التبسيط يؤدي إلى تجاهل تأرجحات النظام و التركيز على سلوكه المتوسط، نظرا لأن حل نموذج ايزينغ مقعد او بعيد المنال لذلك وجب البحث عن طرق تقريبية، الطريقة التقليدية الأساسية التي اقترحها العالم وايس سنة 1907 هي طريقة تقريب الحقل المتوسط إلا إنها لا تقتصر فقط على نموذج ايزينغ بل سنستمر في استخدامها في هذا العمل عند دراستنا للنموذج من اجل الانتقال الطوري [7,8,9,13]، يمكننا الآن أن نتصور بسهولة انه لن يكون ساريا إلا إذا كانت تأرجحات النظام حول قيمته المتوسطة منخفضة هذا بالتأكيد ليس هو الحال بالقرب من النقطة الحرجة [5].

### 1.6.1 صلاحية الحقل المتوسط :

تم اشتقاق مخطط الطور و الأسس الحرجة باستخدام تقريب الحقل المتوسط و لكن هذا التقريب غير مبرر و بالتالي يمكننا أن نطرح السؤال هل نتائجا صحيحة ؟ [1]

يوجد في الواقع نسخة من نموذج ايزينغ الذي تكون فيه هاته النظرية دقيقة  $d = 1$ ، سنناقش حد الصلاحية تفترض نظرية الحقل المتوسط أن التأرجحات ضعيفة هذا بالتأكيد ليس الحال بالقرب من النقطة الحرجة و يؤدي ذلك إلى حقيقة مفادها أنه بالنسبة للعديد من الأنظمة الحقيقية تقريب الحقل المتوسط يكون صالح فقط عندما تكون التأرجحات لا تذكر و مع ذلك لوحظ أن الأسس الحرجة يتم إعادة حسابها بشكل جيد عندما يكون بعد الفضاء الذي يصف النظام كبيرا، من أجل  $d > 4$  نحصل على نتائج صحيحة، كأول تقدير تقريبي يمكننا من فهم ذلك من خلال الإشارة إلى انه أقل خطورة من إهمال التأرجحات عندما يزداد عدد الجيران و هذا هو الحال عندما تزداد بعدية النظام و تصبح نظرية الحقل المتوسط صحيحة في حدود  $d \rightarrow \infty$  و كما قلنا ان الأسس الحرجة المحسوبة تكون جيدة بمجرد  $d > 4$  [5,6].

الفائدة الكبيرة من تقريب الحقل المتوسط هي بساطته مقارنة بالتقريبات الأخرى، يعطي فكرة أولية عن الظاهرة و يعد نقطة انطلاق ممتازة لأوصاف أكثر تطورا [11].

# الفصل الثاني

المجموعة القانونية

و الكميات الترموديناميكية

**2. مقدمة:**

الترموديناميك هو علم يختص بدراسة الخصائص الماكروسكوبية للجمل الفيزيائية المتوازنة حرارياً و التبادلات التي تحدث بين هذه الجمل أي بين أشكال الطاقة الأساسية كمية الحرارة أو العمل، بينما الميكانيك الاحصائي يركز على دراسة الأنظمة من حيث مكوناتها الميكروسكوبية إذن هو همزة وصل بين العالم الماكروسكوبي و العالم الميكروسكوبي [5,26]

سنعرض في هذا الفصل القوانين الأربعة للترموديناميك و تعريف بعض المتغيرات الترموديناميكية و كذلك دوال الحالة، نبدأ أولاً دراستنا من خلال الترموديناميك الذي يعتبر نظرية ظاهرية ناجحة ثم نعيد الوصول إلى ما تمت دراسته من خلال الميكانيك الاحصائي.

**1.2 القوانين الأساسية للترموديناميك :****1.1.2 القانون الصفري :**

لقد تم تعريف القانون الصفري للترموديناميك بعد أن عرف القانون الأول و هو مبني على التجارب، و هو يعنى بخصائص الأنظمة التي هي في حالة توازن حراري و ينص القانون على أنه : إذا وجد نظامين منفصلين مثلاً  $A$  و  $B$  كل منهما في حالة توازن مع نظام ثالث  $C$  فالنظامين  $A$  و  $B$  في حالة توازن مع بعضهما البعض [28,27].

**2.1.2 القانون الأول :**

القانون الأول للترموديناميك ينص صراحة على ثبوت كمية الطاقة الداخلية لنظام معزول من خلال التعريف بان الطاقة الداخلية لنظام معزول هي كمية محفوظة متضمنة ان الحرارة شكل من أشكال الطاقة، ولكي نجد صيغة رياضية للقانون دعونا نعرف بعض الكميات لنظام مغلق كالتالي :

$Q$ : كمية الحرارة

$W$ : العمل المبذول

$U$ : الطاقة الداخلية للنظام

باعتبار أن الضغط  $P$  والحجم  $V$  هما المتغيران اللذان تعتمد عليهما الطاقة الداخلية لنظام فإنه يمكن كتابة مايلي :

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W \quad (1.2)$$

بالنسبة للعمليات الشبه ساكنة من المفيد كتابة العلاقة (1.2) في شكل متناه الصغر، التغير اللامتناه في الطاقة هو مشتق كلي :

$$dU = \frac{\partial U}{\partial P} dP + \frac{\partial U}{\partial V} dV \quad (2.2)$$

إذا كان النظام غير معزول أي أنه يتفاعل مع الوسط الخارجي فإن الطاقة الداخلية تتغير بمقدار  $dU$  خلال هذا التحويل الترموديناميكي فإن النظام يتبادل مع الوسط الخارجي عمل  $dW$  و كمية حرارة  $dQ$  حيث :

$$dU = dQ + dW \quad (3.2)$$

و بالتالي فإن القانون ينص على ان كمية الحرارة المنتقلة إلى النظام تستخدم لزيادة الطاقة الداخلية و أيضا لبذل العمل بواسطة النظام لزيادة حجمه [29,28,27].

القانون الاول يستخدم لحساب الكميات الترموديناميكية التي سنتعرض إليها :

• الحرارة النوعية تحت حجم ثابت :

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (4.2)$$

• الحرارة النوعية تحت ضغط ثابت :

$$C_P = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (5.2)$$

حيث  $H$  هو الأنتالبي يعرف بالعلاقة :

$$H = U + PV$$

$$dW = -PdV \quad \text{حيث}$$

إذن

$$dH = dU + PdV \quad (6.2)$$

و منه

$$dH = dQ \quad (7.2)$$

و معناه ان التغير في الأنتالبي تحت ضغط ثابت يساوي كمية الحرارة المكتسبة بواسطة النظام [26].

### 3.1.2 القانون الثاني :

هناك بعض التحويلات الترموديناميكية التي تحقق القانون الأول لترموديناميك و لكنها لا يمكن ان تحدث بصورة تلقائية في الطبيعة، كمثل نعتير معدن ساخن موضوع داخل ماء بارد المشاهد عادة يرى ان الحرارة تنتقل من المعدن الساخن إلى الماء البارد لكن مع الاعتماد فقط على القانون الاول لترموديناميك يمكن للحرارة ان تنتقل من البارد إلى الساخن بحيث يزداد المعدن سخونة و يزداد الماء برودة لكن هذا غير مشاهد في الطبيعة [29,21].

القانون الثاني لترموديناميك يهدف إلى توضيح الاتجاهات التي تنتقل فيها الحرارة حيث تظهر صيغ مختلفة له، لكنها تؤدي إلى نفس الغرض وسنكتفي هنا بالصيغتين التاليتين: [23,5,1]

- **صيغة كلاسيوس:** لا يمكن أن تنتقل الحرارة ذاتيا من الجسم البارد إلى الجسم الساخن.
  - **صيغة كلفن:** لا يمكن أن تتحول الحرارة كليا إلى عمل في أي عملية دائرية، لكن يمكن أن يتحول العمل كليا إلى حرارة في العمليات التلقائية.
- لقد وجد كلاسيوس من خلال ملاحظاته لأي عملية حقيقية لنظام متلامس حراريا مع الوسط المحيط به عند درجة الحرارة، أن الكمية :

$$dS = \frac{dQ}{T} \quad (8.2)$$

تكون دائما موجبة أو قريبة جدا من الصفر للتحويلات شبه العكوسة حيث أنه من الطبيعي أن تتجه التحويلات الفيزيائية نحو الاتزان، فقد إستنتج كلاسيوس أن قيمة  $S$  سوف تتعظم عند الوصول لحالة الاتزان وقد سميت الكمية  $S$  بالانتروبي و وجد الشرط المحقق لها لنظام معزول هو :

$$\Delta S > 0$$

و خلال التحويلات الانعكاسية فقط نجد ان التغير في الانتروبي  $dS$  يرتبط بكمية الحرارة المنتقلة  $dQ$  إلى النظام و درجة حرارته المطلقة  $T$  بالعلاقة [26,5]:

$$dS = \frac{dQ}{T} \rightarrow dQ = TdS \quad (9.2)$$

و لهذا فإن القانون الأول يؤول إلى :

$$dU = TdS + PdV \quad (10.2)$$

و منه نحصل على العلاقات التالية:

$$\frac{P}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_{N,E} \quad (11.2)$$

$$P = - \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_{N,T} \quad (12.2)$$

$$T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{N,V} \quad (13.2)$$

### 4.1.2 القانون الثالث :

يحكم القانون الثالث لترموديناميك تصرف الأنظمة المتزنة عندما تقترب درجة حرارتها من الصفر المطلق و سوف نذكر نص أحد القوانين : " جميع التفاعلات في النظام كالسوائل و الأجسام الصلبة، و التي هي في حالة اتزان تحدث بدون تغير في الانتروبي عند اقتراب النظام من الصفر المطلق "

و بالرغم من أن القانون وضع للأجسام الصلبة و السوائل فإنه يفترض أيضا تطبيقه على الغازات إذا وجدت عند هذه الدرجة [1,5,26,28].

## 2.2 المجموعة القانونية الصغرى:

المسلمة الاولى للميكانيك الاحصائي التي تنص على تساوي احتمال الحالات الميكروسكوبية تؤدي مباشرة إلى جملة معزولة في حالة توازن ترموديناميكي يجب أن تنتمي إلى مجموعة احصائية مميزة باحتمال ثابت هذه المجموعة تعرف بالمجموعة القانونية الصغرى، إن استعمال هاته المجموعة في التطبيق معقد عموما و بالتالي فإننا نستعمل مكانها تقريبات اخرى كالمجموعة القانونية و المجموعة القانونية الكبرى.

من المعلوم أن طاقة جملة معزولة و لتكن  $E_0$  هذه الطاقة ثابتة بالضرورة ، في العموم هناك دائما ارتياب راجع إلى الأخطاء التجريبية و التأثيرات الفيزيائية الناجمة عن الميكانيك الكمي، طاقة الجملة إذن في المجال بين  $E_0$  و  $E_0 + \delta E$  أما الحالات الميكروسكوبية المسموح بها للجملة فهي لها طاقة  $E$  حيث :

$$E_0 \leq E \leq E_0 + \delta E , (\delta E \ll E) \quad (14.2)$$

كما فعلنا في السابق عوض اعتبار جملة واحدة و اتباع تطورها في الزمن نعتبر مجموعة من الجمل المتطابقة مع الجملة الأصلية من الناحية الماكروسكوبية لا يمكن التمييز بينها باجراء قياسات على المقادير الماكروسكوبية، كل جملة من هذه المجموعة هي في حالة ميكروسكوبية تحقق الشرط اعلاه .

نفترض التوازن الاحصائي و بالتالي كل الحالات الميكروسكوبية هي متساوية الاحتمال، هذه المجموعة الاحصائية تسمى المجموعة القانونية الصغرى.

ليكن  $\Omega(E)$  عدد الحالات الميكروسكوبية التي لها طاقة بين  $E$  و  $E + \delta E$  أنتروبي الجملة يعطى بالمعادلة [1,6,28]:

$$S = K \ln \Omega(E) \quad (15.2)$$

## 3.2 المجموعة القانونية :

تكون المجموعة القانونية مناسبة بشكل خاص للأنظمة المغلقة مع المتغيرات الطبيعية  $E$  و  $V$  و  $N$  [21] سندرس النظام  $S$  في توازن حراري مع خزان حراري درجة حرارته  $T$  ثابتة بالرغم من التبادلات الحرارية المحتملة للحرارة مع النظام  $S$  [5].

الطاقة الكلية للنظام لها قيمة ثابتة  $E_0$

$$E_0 = E_r + E_T \quad (16.2)$$

حيث :

$E_r$ : طاقة النظام  $S$

$E_T$ : طاقة الخزان الحراري

تعطى عبارة احتمال تواجد النظام في الحالة  $j$  بـ :

$$\mathcal{P}(E_r) = \frac{\Omega_T(E_0 - E_r)}{\Omega} \quad (17.2)$$

حيث :

$\Omega_T(E_0 - E_r)$  : عدد الحالات الميكروسكوبية الكلية ( النظام + الخزان ).

بما أن الخزان الحراري له درجات حرية أكثر من النظام  $S$  فإن  $E_r \leq E_0$  و  $E_r \leq E_T$  إذن سيسمح لنا بنشر الدالة  $\ln \Omega_T(E_0 - E_r)$  نشر تايلور حول  $E_0$  :

$$\ln \Omega_T(E_0 - E_r) = \ln \Omega_T(E_0) - \left( \frac{\partial \ln \Omega_T}{\partial E} \right)_{E=E_0} E_r + \dots \quad (18.2)$$

حيث :

$$\left( \frac{\partial \ln \Omega_T}{\partial E} \right)_{V,N} = \frac{1}{KT} = \beta \quad (19.2)$$

إذن

$$\ln \Omega_T(E_0 - E_r) = \ln \Omega_T(E_0) - \beta E_r \quad (20.2)$$

$$\Omega_T(E_0 - E_r) = \Omega_T(E_0) e^{-\beta E_r} \quad (21.2)$$

الكمية  $\Omega_T(E_0)$  إذن نكتب العبارة (16.2) بـ

$$\mathcal{P}(E_r) = C. e^{-\beta E_r} \quad (22.2)$$

$$\frac{1}{C} = \sum_r \sum_j e^{-\beta E_r} \quad (23.2)$$

تمثل الكمية  $\frac{1}{C}$  في الفيزياء الإحصاء بدالة التوزيع

$$Z = \sum_r \sum_j e^{-\beta E_r} \quad (24.2)$$

تلعب دالة التوزيع دور مهم في فيزياء الإحصاء، يمكننا كتابة احتمال تواجد النظام في الحالة  $r$  بـ :

$$\mathcal{P}(E_r) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r} \quad (25.2)$$

إذا كان  $g_r$  هو الانحلال في المستوي  $r$  نستطيع كتابة  $Z$  كما يلي:

$$Z = \sum_r g_r e^{-\beta E_r} \quad (26.2)$$

إذا كان طيف مستويات الطاقة مستمرا أو قريبة جدا من بعضها البعض تعطى دالة التوزيع  $Z$  بـ :

$$Z = \int W(E) e^{-\beta E} dE \quad (27.2)$$

## 4.2 حساب الكميات الترموديناميكية :

تعتمد دالة التوزيع  $Z = Z(T, V, N)$  على درجة الحرارة  $T$  و عدد الجسيمات  $N$  و الحجم  $V$ ، إذن ستمكنا من حساب جميع الكميات الترموديناميكية .

### 1.4.2 الطاقة الداخلية :

هي القيمة المتوسطة للطاقة في المجموعة القانونية لدينا :

$$\mathcal{P}(E_r) = \frac{\sum_r e^{-\beta E_r}}{Z} = \frac{g_r e^{-\beta E_r}}{Z} \quad (28.2)$$

تعطى الطاقة المتوسطة  $\langle E \rangle$  بـ :

$$\langle E \rangle = \sum_r E_r \mathcal{P}(E_r) = \frac{1}{Z} \sum_r \sum_j E_r e^{-\beta E_r} \quad (29.2)$$

نلاحظ ان

$$\sum_r \sum_j E_r e^{-\beta E_r} = - \sum_r \sum_j \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_r} \quad (30.2)$$

$$= - \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_r \sum_j e^{-\beta E_r} = - \frac{\partial}{\partial \beta} Z \quad (31.2)$$

و منه ستكون عبارة  $\langle E \rangle$  كالتالي :

$$\langle E \rangle = - \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)_{V,N} = - \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{V,N} \quad (32.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = -KT^2 \frac{\partial}{\partial T} \quad \text{أي ،} \quad \beta = \frac{1}{KT} \quad \text{نأخذ}$$

و منه تكتب عبارة الطاقة المتوسطة بـ :

$$\langle E \rangle = KT^2 \left( \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \right)_{V,N} \quad (33.2)$$

إذا كانت تأرجحات  $E$  حول  $\langle E \rangle$  ضعيفة يمكننا استبدال المجموعة القانونية بالمجموعة القانونية الصغرى إذا كانت  $E$  ثابتة. لذا من المهم حساب الانحراف المعياري  $\Delta E$

$$\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (34.2)$$

بما أننا نعرف قيمة  $\langle E \rangle$  نحسب قيمة  $\langle E^2 \rangle$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_r E_r^2 \mathcal{P}(E_r) = \frac{1}{Z} \sum_r \sum_j E_r^2 e^{-\beta E_r} \quad (35.2)$$

$$\begin{aligned} E_r^2 e^{-\beta E_r} &= -E_r \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_r} = -\frac{\partial}{\partial \beta} E_r e^{-\beta E_r} = \left( \frac{\partial}{\partial \beta} \right)^2 e^{-\beta E_r} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\beta E_r} \end{aligned} \quad (36.2)$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (37.2)$$

نلاحظ أن

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \frac{1}{Z} \right) \frac{\partial Z}{\partial \beta} + \frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z + \langle E \rangle^2 \quad (38.2)$$

إذن

$$(\Delta E)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \quad (39.2)$$

$$(\Delta E)^2 = KT^2 \left( \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_{V,N} = KT^2 C_V \quad (40.2)$$

## 2.4.2 الضغط :

نفترض أن درجة الحرارة  $T$  و عدد الجسيمات  $N$  ثابتتان و نفترض أن الحجم  $V$  يتغير بالقيمة  $dV$ ، الأمر الذي ينتج عنه تغييرات في مستويات الطاقة [26,28].

تعطى عبارة الضغط عندما يكون النظام في الحالة  $E_r$  بـ :

$$P_r = - \left( \frac{\partial E_r}{\partial V} \right)_{\beta, N} \quad (41.2)$$

الضغط المقاس على المستوى الماكروسكوبي هو القيمة المتوسطة في المجموعة القانونية .

$$\langle P \rangle = \sum_r P_r \mathcal{P}(E_r) = \frac{1}{Z} \sum_r \sum_j \left( -\frac{\partial E_r}{\partial V} \right) e^{-\beta E_r} \quad (42.2)$$

نلاحظ أن :

$$\frac{\partial}{\partial V} e^{-\beta E_r} = \beta E_r e^{-\beta E_r} \frac{\partial E_r}{\partial V} \quad (43.2)$$

و التي تعطي :

$$\langle P \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial V} \sum_r \sum_j e^{-\beta E_r} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial V} \quad (44.2)$$

أو

$$\langle P \rangle = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_{\beta, N} = KT \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_{T, N} \quad (45.2)$$

عندما تكون  $N$  كبيرة فإن تأرجحات  $P$  حول  $\langle P \rangle$  مهملة و بالتالي كل قياس للضغط يؤدي إلى القيمة المتوسطة  $\langle P \rangle$  نتيجة لهذا نرسم للكميات الترموديناميكية مثل  $\langle P \rangle$  و  $\langle E \rangle$  على الترتيب بـ  $P$  و  $E$  [26,8,5].

### 3.4.2 الأنتروبي:

نفترض ان عدد الجسيمات  $N$  ثابت وبالتالي دالة التوزيع تتعلق بـ  $T$  (أي  $\beta$ ) و  $V$  و لذلك يمكن كتابة :

$$Z = Z(\beta, V) = Z(T, V)$$

نكتب عبارة الاشتقاق الكلي لـ  $\ln Z$  بـ :

$$d \ln Z = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (46.2)$$

أو بالشكل

$$d \ln Z = -\langle E \rangle d\beta + \beta \langle P \rangle dV \quad (47.2)$$

أو

$$d(\beta \langle E \rangle) = \langle E \rangle d\beta + \beta d \langle E \rangle \quad (48.2)$$

نأخذ مجموع المعادلتين (47.2) و (48.2) نجد :

$$d(\ln Z + \beta \langle E \rangle) = \beta(d \langle E \rangle + \langle P \rangle dV) \quad (49.2)$$

أو

$$d \langle E \rangle = T dS - \langle P \rangle dV \quad (50.2)$$

إذن

$$d(\ln Z + \beta \langle E \rangle) = \beta T dS = \frac{dS}{K} \quad (51.2)$$

نجد بعد التكامل :

$$S = K(\ln Z + \beta \langle E \rangle) \quad (52.2)$$

عند درجة حرارة الصفر المطلق أي  $\beta \rightarrow \infty, S \rightarrow K \ln g_0$  حيث  $g_0$  هو انحلال المستوى الطاقوي الأساسي أي أننا نختار ثابت التكامل و بهذا نحصل على القانون الثالث لترموديناميك [27,21,6].

#### 4.4.2 الطاقة الحرة :

عبارة الانتروبي يمكن كتابتها بالشكل :

$$\langle E \rangle - TS = -KT \ln Z \quad (53.2)$$

الطرف الأول للعبارة يقدم تعريفا للطاقة الحرة  $F$

إذن:

$$F = -KT \ln Z \quad (54.2)$$

$$Z = e^{-\frac{F}{KT}} \quad (55.2)$$

و منه نحصل على عبارة الانتروبي أيضا: [23]

$$S = \left( -\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (56.2)$$

#### 5.4.2 الكمون الكيميائي :

حتى هذه اللحظة كل ما نفترضه هو أن عدد الجسيمات  $N$  ثابت .

كما نفترض الآن أن عدد الجسيمات غير ثابت عند إذن نكتب:

$$F = -KT \ln Z \quad (57.2)$$

$$dF = -d(-KT \ln Z) \quad (58.2)$$

نقيم الطرف الثاني :

$$\begin{aligned} -d(KT \ln Z) &= -K \left( \frac{\partial}{\partial T} T \ln Z \right)_{V,N} dT \\ &\quad -KT \left( \frac{\partial}{\partial V} \ln Z \right)_{T,V} dV \\ &\quad -KT \left( \frac{\partial}{\partial N} \ln Z \right)_{T,V} dN \end{aligned} \quad (59.2)$$

هذا يؤدي بنا إلى العلاقة :

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN \quad (60.2)$$

نطابق بين (59.2) و (60.2) نجد :

$$P = KT \left( \frac{\partial}{\partial V} \ln Z \right)_{T,N} \quad (61.2)$$

$$\begin{aligned} S &= K \left( \frac{\partial}{\partial T} T \ln Z \right) = K \ln Z + KT \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right)_{V,N} \\ &= K(\ln Z + \beta \langle E \rangle) \end{aligned} \quad (62.2)$$

نحصل على الكمون الكيميائي :

$$\mu = -KT \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial N} \right)_{T,V} = -\frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (63.2)$$

تعطى عبارة الكمون الكيميائي  $\mu_r$  المرتبط بالحالة الميكروسكوبية  $r$  بـ :

$$\mu_r = \left( \frac{\partial E_r}{\partial N} \right)_{T,N} \quad (64.2)$$

الكمون الكيميائي يمكن حسابه بالطريقة التي استعملت من أجل الضغط المتوسط، و بالتالي يمكن التعبير عن القيمة المتوسطة للكمون الكيميائي  $\langle \mu \rangle$  بـ  $\mu$  [21,8,6]

## 6.4.2 السعة الحرارية :

تعطى بـ [5,1]:

$$\begin{aligned} C_V &= \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_V \\ C_V &= \left( \frac{\partial}{\partial T} \left( -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right) \right)_V \end{aligned} \quad (65.2)$$

ومنه :

$$\begin{aligned} C_V &= \left( \frac{\partial \beta}{\partial T} \times \frac{\partial}{\partial \beta} \left( -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right) \right)_V \\ C_V &= \left( -\frac{1}{KT^2} \times \left( -\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right) \right)_V \end{aligned} \quad (66.2)$$

و منه تصبح :

$$C_V = \frac{1}{KT^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z \right)_V \quad (67.2)$$

### 7.4.2 المغنطة :

تعرف المغنطة بـ [23]:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial H} \quad (68.2)$$

بتعويض عبارة  $Z$  نجد :

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\left( \partial \ln e^{\frac{-F}{KT}} \right)}{\partial H}$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \left( \frac{-F}{KT} \right)}{\partial H} \quad (69.2)$$

و منه :

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} (-\beta F) \quad (70.2)$$

إذن :

$$\langle M \rangle = - \frac{\partial F}{\partial H} \quad (71.2)$$

## 5.2 تطبيقات المجموعة القانونية :

### 1.5.2 البارامغناطيسية :

النظام عبارة على مجموعة من الجسيمات  $N$  ذات عزم مغناطيسي دائم، بافتراض أن هذه الجسيمات تملك إلكترونات واحدا عازبا يكون عزمه المداري معدوم .

إذن العزم المغناطيسي يعطى بـ:

$$\vec{M} = g \frac{e}{2m_e} \vec{S} \quad (72.2)$$

حيث :

$m_e$ ،  $e$  : شحنة و كتلة الإلكترون على الترتيب

$\vec{S}$  : العزم الحركي الذاتي

$g$ : معامل لاندي ( $g = 2$  بالنسبة للإلكترون)

إذا طبقنا حقل مغناطيسي  $\vec{B}$  فإن الجسيمات تميل إلى التوجه في اتجاه المجال المغناطيسي لكن التحريض الحراري سيعارض ذلك، في ميكانيكا الكم الطاقة الكامنة لا يمكن ان تأخذ إلا قيمتين  $E_+ = -MB$  إذا كان  $\vec{M}$  موازي لـ  $\vec{B}$  و  $E_- = +MB$  إذا كان  $\vec{M}$  عكس  $\vec{B}$ .

يمكن تطبيق المجموعة القانونية على كل جسيم إذا كانت درجة حرارة الشبكة  $T$  ثابتة لأنها فعلياً تتصرف كذرات متميزة، باقي الجسيمات الأخرى تلعب دور الخزان الحراري.

الإحتمالات الموجودة في المستويين  $E_+$  و  $E_-$  تعطى بـ :

$$P_+ = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_+} , P_- = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_-}$$

إذن دالة التوزيع تأخذ الشكل :

$$Z = e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-} \quad (73.2)$$

نضع  $x = \beta MB$  نجد :

$$Z = e^x + e^{-x} \quad (74.2)$$

العزم المغناطيسي المتوسط يعطى بـ :

$$\langle M \rangle = \frac{MP_+ - MP_-}{Z} = M \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = M \tanh \frac{MB}{KT} \quad (75.2)$$

إذا كانت درجة الحرارة  $T$  عالية ( $T \gg MB$ ) أي :  $\tanh x \rightarrow 1$  ,  $x \rightarrow \infty$  و منه :

$$\langle M \rangle = \frac{M^2 B}{KT} \rightarrow 0 \quad (76.2)$$

المستويان  $E_+$  و  $E_-$  متساويان في الطاقة أي  $P_- = P_+ = \frac{1}{2}$  ، تفوق الطاقة الحرارية الطاقة المغناطيسية و يتم توزيع  $\vec{M}$  بشكل متساوي في كلا الاتجاهين.

إذا كانت درجة الحرارة  $T$  منخفضة ( $T \ll MB$  ,  $T \rightarrow 0$ ) أي :  $\tanh x \rightarrow 1$  ,  $x \rightarrow \infty$  حيث  $\langle \mathcal{M} \rangle \rightarrow M$

إذا  $P_+ = 1$  و  $P_- = 0$  النظام في المستوى الأدنى (الأساسي) متوسط العزم المغناطيسي الكلي يعطى بـ :

$$\langle \mathcal{M} \rangle = N \langle M \rangle \quad (77.2)$$

نسمي الحساسية المغناطيسية  $\chi$  معامل التناسب بين  $\langle \mathcal{M} \rangle$  و  $B$  عندما  $B \rightarrow 0$

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \chi \quad (78.2)$$

إذا كانت  $MB \gg T$  نكتب :

$$\chi = \frac{NM^2}{KT} \quad (79.2)$$

تناسب الحساسية المغناطيسية مع  $\left(\frac{1}{T}\right)$  ( قانون كوري) [26,6,1].

# الفصل الثالث

دراسة عددية لبعض الكميات  
الترموديناميكية

**3. مقدمة:**

تعد الظاهرة الفيرومغناطيسية من أهم الظواهر الفيزيائية و أعقدها و هي من أشهر الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية [21]، و لفهم هذه الظاهرة اجتهد الفيزيائيون لوضع نموذج يمكنهم من فهمها لذلك أقترح نموذج سمي بنموذج ايزينغ [4] و الذي ستم دراسته في هذا الفصل من خلال تقريب الحقل المتوسط و كذلك محاكاة مونت كارلو بالاعتماد على خوارزمية متروبوليس و التطرق إلى الوصف النظري للنموذج و ارتباطه بالانتقالات الطورية.

**1.3 الوصف النظري لنموذج ايزينغ :**

النموذج الذي سنستخدمه في دراستنا حول التحولات الطورية في درجة حرارة محدودة للأنظمة المغناطيسية هو نموذج ايزينغ.

الطاقة في أبسط أشكالها يعبر عنها بـ :

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i \quad (1.3)$$

مع  $S_i = \pm 1$  ،  $N$  هو العدد الكلي للسينات،  $J$  هو ثابت الاقتران يعبر عن قوة التفاعل بين السينات المتجاورة.

$B$  هو الحقل المغناطيسي الخارجي المتفاعل مع العزم المغناطيسي الذي أنشأته السينات، يشير الرمز  $\langle ij \rangle$  على الجمع على الجوار الأقرب فقط [30,29]

نلاحظ أنه من أجل  $J > 0$  هي الطاقة المفضلة للسينات المتجاورة نتيجة توجيهها في اتجاه واحد، هذه الميزة تؤدي إلى، في درجات حرارة منخفضة بما فيه الكفاية إلى ظاهرة تعاونية تسمى بالمغطة التلقائية أي من خلال التفاعلات بين الجوارات الأقرب، يمكن لعزم مغناطيسي معين التأثير على محاذاة السينات التي يتم فصلها عن السبين المحدد بواسطة مسافة عيانية، ترتبط هذه الارتباطات طويلة المدى بين السينات بترتيب بعيد المدى بحيث يكون للشبكة مغطة حتى في غياب الحقل المغناطيسي الخارجي [31,30].

في دراستنا لنموذج ايزينغ سنقتصر الدراسة على  $B = 0$  ، من أجل حساب القيم المتوسطة مثل القيمة المتوسطة للطاقة  $\langle E \rangle$  أو المغطة  $\langle M \rangle$  في الفيزياء الإحصائية عند درجة حرارة معينة نحتاج إلى إجمال التوزيع :

$$P_i(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (2.3)$$

حيث  $\beta = \frac{1}{K_B T}$  هي مقلوب درجة الحرارة،  $K$  ثابت بولتزمان و  $E_i$  هي طاقة الحالة  $i$  في حين  $Z$  هي دالة التوزيع للمجموعة القانونية و تعطى عبارتها بـ :

$$Z = \sum_{i=1}^M e^{-\beta E_i} \quad (3.3)$$

حيث المجموع يمتد على جميع الحالات الميكروسكوبية  $M$ .

يعبر  $\mathcal{P}_i$  على إحتمال وجود النظام في تشكيلة معينة  $i$ ، تعطى عبارة الطاقة لتشكيلة المحددة  $i$  بـ :

$$E_i = \sum_{\langle ij \rangle}^N S_i S_j \quad (4.3)$$

من أجل فهم أفضل ما تعنيه التشكيلة نعتبر الحالة الأولى نموذج ايزينغ في بعد واحد مع  $B = 0$ ،  
عموما تشكيلة معينة ذات  $N$  سبين في بعد واحد يمكن أن ترى على الشكل التالي:

$$\begin{array}{ccccccc} \uparrow \uparrow \uparrow \dots & \uparrow \downarrow \uparrow & \dots & \uparrow \downarrow \\ 1 & 2 & 3 & \dots & i-1 & i & i+1 & \dots & N-1 & N \end{array}$$

لتوضيح هذه الميزات دعنا نقتصر الدراسة على سبينين فقط و لأن السبين يأخذ قيمتين فقط فإنه لدينا  $2^2 = 4$  ترتيبية ممكنة.

الإحتمالات الأربعة الممكنة للسبينين:

$$1 = \uparrow\uparrow \quad 2 = \uparrow\downarrow \quad 3 = \downarrow\uparrow \quad 4 = \downarrow\downarrow$$

ماهي طاقة كل تشكيلة؟

من أجل الأنظمة الصغيرة فإن الطريقة التي نتعامل بها مع مشاكل النهايات، غالبا ما نستعمل حالتين فقط :

1. في الحالة الأولى نستخدم ما يسمى بالنهايات الحرة، هذا يعني أنه لا توجد أي مساهمة على يمين و يسار النهاية.

لحالة أحادية البعد تكتب الطاقة كمجموع على شعاع واحد :

$$E_i = -J \sum_{j=1}^{N-1} S_j S_{j+1} \quad (5.3)$$

إذا أشرنا إلى السبين الأول  $S_1$  والسبين الثاني  $S_2$  نحصل على الطاقة التالية :

$$E = -J S_1 S_2 \quad (6.3)$$

بالنسبة للحالة المحددة  $E_1$  فقد اخترنا كل السبينات للأعلى، طاقة هذه التشكيلة تصبح بعد ذلك :

$$E_1 = E_{\uparrow\uparrow} = -J$$

تعطى التشكيلات الأخرى بـ :

$$E_2 = E_{\uparrow\downarrow} = +J$$

$$E_3 = E_{\downarrow\uparrow} = +J$$

$$E_4 = E_{\downarrow\downarrow} = -J$$

2. يمكن اختيار ما يسمى بالشروط الدورية الحدية، هذا يعني أن الجوار إلى يمين  $S_N$  يفترض أن

يأخذ القيمة  $S_1$  و بالمثل فإن الجوار إلى يسار  $S_1$  يأخذ القيمة  $S_N$  [13,32].

في هذه الحالة طاقة الشبكة أحادية البعد تقرأ كما يلي :

$$E_i = -J \sum_{j=1}^N S_j S_{j+1} \quad (7.3)$$

من أجل 2 سبين نتحصل على العبارة التالية:

$$E = -J(S_1S_2 + S_2S_1) \quad (8.3)$$

في هذه الحالة عبارة  $E_1$  ستكون مختلفة :

$$E_1 = E_{\uparrow\uparrow} = -2J$$

و في الحالات الأخرى أيضا مختلفة :

$$E_2 = E_{\uparrow\downarrow} = +2J$$

$$E_3 = E_{\downarrow\uparrow} = +2J$$

$$E_4 = E_{\downarrow\downarrow} = -2J$$

و بالرغم من اختلاف التشكيلات تبقى المغنطة نفسها، و تعرف بـ :

$$M_i = \sum_{j=1}^N S_j \quad (9.3)$$

حيث نلخص كل السبينات في تشكيلة معينة  $i$  [32,9].

يعرض الجدول (1.3) الطاقة و المغنطة بالنهايات الحرة (FE) و الشروط الدورية الحدية (PBC) يمكن إعادة تنظيم الجدول (1.3) وفقا لعدد السبينات الموجهة للأعلى كما هو موضح في الجدول (2.3) تجدر الإشارة إلى أنه بالنسبة للأبعاد الصغيرة للشبكة فإن الطاقة تختلف اعتمادا على ما إذا كنا نستخدم الشروط الدورية الحدية أو النهايات الحرة [32].

**الجدول (1.3):** الطاقة و المغنطة لنموذج ايزينغ أحادي البعد مع 2 سبين بـ (FE) و (PBC)

المغنطة	طاقة (PBC)	طاقة (FE)	الحالة
2	$-2J$	$-J$	$1 = \uparrow\uparrow$
0	$+2J$	$+J$	$2 = \uparrow\downarrow$
0	$+2J$	$+J$	$3 = \downarrow\uparrow$
-2	$-2J$	$-J$	$4 = \downarrow\downarrow$

الجدول (3.2): الانحلال، الطاقة و المغنطة لنموذج ايزينغ أحادي البعد مع 2 سبين بـ (FE) و (PBC)

عدد السبينات للأعلى	الانحلال	طاقة (FE)	طاقة (PBC)	المغنطة
2	1	$-J$	$-2J$	2
1	2	$+J$	$+2J$	0
0	1	$-J$	$-2J$	-2

عند  $N \rightarrow \infty$  النتائج النهائية لا تعتمد على نوع الشروط الحدية التي نختارها.

من أجل نموذج ايزينغ في بعد واحد يمكن حساب دالة التوزيع الدقيقة و ببساطة من أجل  $N$  سبين، نعتبر أولاً الحالة بنهايات حرة تكتب الطاقة كما يلي [15,7]:

$$E = -J \sum_{j=1}^{N-1} S_j S_{j+1} \quad (10.3)$$

تعطى دالة التوزيع من أجل  $N$  سبين كالتالي :

$$Z_N = \sum_{S_{N=\pm 1}} \dots \sum_{S_{N=\pm 1}} \exp(\beta J \sum_{j=1}^{N-1} S_j S_{j+1}) \quad (11.3)$$

و لأن السبين الاخير يظهر مرة واحدة فقط في المجموع الاخير في الأس يمكن أن نعزل السبين كما يلي :

$$\sum_{S_{N=\pm 1}} \exp(\beta J S_{N-1} S_N) = 2 \cosh(\beta J) \quad (12.3)$$

تتكون دالة التوزيع بعد ذلك جزء من السبين و جزء آخر من السبينات المتبقية نتحصل على :

$$Z_{N-1} = Z_N 2 \cosh(\beta J) \quad (13.3)$$

بعد تكرار هذا الإجراء نتحصل على :

$$Z_N = 2(2 \cosh(\beta J))^{N-1} \quad (14.3)$$

في النهاية الترموديناميكية أين  $N \rightarrow \infty$ ، الطريقة التي عالجتنا بها النهايات (الحدود) ليست مهمة مع ذلك بما أن حساباتنا ستتم دائماً بأخذ قيم محدودة لـ  $N$  فإننا بحاجة إلى اعتبار شروط حدية أخرى و التي تسمى الشروط الحدية الدورية [15].

إذا استعملنا الشروط الحدية الدورية فإن دالة التوزيع تعطى بـ :

$$Z_N = \sum_{S_{N=\pm 1}} \dots \sum_{S_{N=\pm 1}} \exp(\beta J \sum_{j=1}^N S_j S_{j+1}) \quad (15.3)$$

حيث أن الجمع الظاهر في الأس يعرف الطاقة بالشكل التالي :

$$E = -J \sum_{j=1}^N S_j S_{j+1} \quad (16.3)$$

و عليه يمكن كتابة دالة التوزيع بالشكل :

$$Z_N = \sum_{\{S_N = \pm 1\}} \prod_{i=1}^N \exp(\beta J S_i S_j) \quad (17.3)$$

$$Z_N = 2^N ([\cosh(\beta J)]^N + \sinh(\beta J)^N] \quad (18.3)$$

عند النهاية  $N \rightarrow \infty$  تتوافق دالتي التوزيع بالنهايات الحرة و الشروط الدورية الحدية في المرحلة المتقدمة لخوازمية متروبوليس و الشفرة التي تحويها لذلك من المفيد حساب خصائص مثل الطاقة الداخلية و السعة الحرارية لهاتين الحالتين و اختبار النتائج مقارنة بالنتائج الناتجة عن الشفرة، يمكننا بعد ذلك حساب الطاقة المتوسطة بالنهايات الحرة من صيغة دالة التوزيع باستخدام [32,15] :

$$\langle E \rangle = \frac{-\partial \ln Z}{\partial \beta} = -(N-1)J \tanh(\beta J) \quad (19.3)$$

تعطى الطاقة الحرة بـ :

$$F = -K_B T \ln Z_N = -NK_B T \ln(2 \cosh(\beta J)) \quad (20.3)$$

السعة الحرارية في بعد واحد مع النهايات الحرة :

$$C_V = \frac{1}{KT^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z_N = (N-1)K \left( \frac{\beta J}{\cosh(\beta J)} \right) \quad (21.3)$$

### 2.3 نموذج ايزينغ و الانتقالات الطورية :

يخضع نموذج ايزينغ في بعدين مع  $B = 0$  إلى انتقال طوري من الدرجة الثانية مما يعني أنه تحت درجة حرارة معينة  $T_C$  حيث يعرض نموذج ايزينغ مغنطة تلقائية مع  $\langle M \rangle \neq 0$  ، عند درجة حرارة فوق  $T_C$  يكون متوسط المغنطة  $\langle M \rangle = 0$  ، تقترب المغنطة المتوسطة من الصفر عند  $T_C$  مع ميل لانتهائي مثل هذا السلوك هو مثال على ما يسمى بالظواهر الحرجة، عادة ما تتميز الظاهرة الحرجة بوحدة أو أكثر من المتغيرات الترموديناميكية التي تنعدم عند  $T > T_C$  في حالتنا هذه هي متوسط المغنطة  $\langle M \rangle \neq 0$  و تسمى بوسيط الترتيب [7,1] .

درست الظواهر الحرجة على نطاق واسع في الفيزياء، أحد اهم الأسباب الأساسية هو أننا لا نملك فهما كافيا لخصائص النظام في جوار النقطة الحرجة، حتى من أجل الأنظمة ثلاثية الأبعاد البسيطة لا يمكننا التنبؤ بالضبط بقيم المتغيرات الترموديناميكية المختلفة، الطرق النظرية المبسطة مثل نماذج الحقل المتوسط يمكنها التنبؤ بنتائج فيزيائية خاطئة، ينتج عن نظرية تقريب الحقل المتوسط انتقال طوري من الدرجة الثانية لنموذج ايزينغ احادي البعد بينما رأينا في السابق ان نموذج ايزينغ احادي البعد لا ينتبأ بأي مغنطة تلقائية في أي درجة حرارة محددة [13].

في حالة ثنائي البعد ننتقل من طور ذو مغنطة محددة  $\langle M \rangle \neq 0$  إلى طور بارامغناطيسي ذو  $\langle M \rangle = 0$  عند درجة حرارة حرجة  $T_C$ ، عند هذه الدرجة تكون الكميات مثل السعة الحرارية  $C_V$  والحساسية  $\chi$  غير مستمرة أو متباعدة عند النقطة الحرجة في النهاية الترموديناميكية مثلا مع شبكة بلورية لا نهائية، هذا يعني أن التباين في الطاقة و المغنطة غير مستمر و مع ذلك بالنسبة للشبكة المنتهية سيتم دائما قياس التباين ك  $1/\sqrt{M}$ ، على سبيل المثال عدد التشكيلات التي تتناسب في

حالتنا مع  $L$  و  $N$  هو عدد السبينات في الإتجاهين  $x$  و  $y$ ، العدد الكلي لسبينات هو  $N = L \times L$  معطيا إجمالي الحالات الميكروسكوبية  $M = 2^N$ ، بما أن الشبكات ستكون ذات أبعاد منتهية فإن السعة الحرارية أو الحساسية لن تظهر السلوك التباعدي و مع ذلك سنلاحظ وجود عرض أعظمي مثلا  $C_V$  بالقرب من  $T_C$  هذا العرض الأعظمي يصبح أكثر حدة و وضوحا مع زيادة  $L$ ، بالقرب من  $T_C$  يمكننا تمييز سلوك العديد من الكميات الفيزيائية بقانون أسي [32,21,7].

لقد أظهرنا سابقا ان متوسط المغنطة تعطى عند  $T < T_C$  :-

$$\langle M(T) \rangle \sim |T - T_C|^\beta \quad (22.3)$$

حيث  $\beta = 1/8$  و هو مايسمى بالأس الحرج، هناك علاقة مماثلة تنطبق على السعة الحرارية  $C_V$

$$C_V(T) \sim |T_C - T|^{-\alpha} \quad (23.3)$$

و الحساسية :

$$\chi(T) \sim |T_C - T|^{-\gamma} \quad (24.3)$$

مع  $\alpha = 0$  و  $\gamma = -7/8$ .

### 3.3 تقريب الحقل المتوسط :

يتيح تقريب الحقل المتوسط حل النموذج من الناحية التحليلية و قد طور من أجل دراسة أنظمة الأجسام المتفاعلة، تتمثل فكرة تقريب الحقل المتوسط بأخذ أحد السبينات  $S_i$  بإفتراض أن طاقته  $E_i$  التي يمكن الحصول عليها من خلال تعويض باقي السبينات بقيمها المتوسطة  $\langle S_i \rangle$  و هذا يؤدي بنا إلى المسألة الكلاسيكية للبارامغناطيسية و التي هي شكل من أشكال المغناطيسية تظهر فقط في وجود مجال مغناطيسي خارجي و تزول بزواله [29,13,9].

إذن تعطى طاقة السبين  $S_i$  بالعبرة :

$$E_i = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \langle S_j \rangle - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (25.3)$$

إعتادا على ما إذا كان السبين للأعلى (+1) أو للأسفل (-1) فإن طاقة السبين لها قيمتان  $E_{i+}$  أو  $E_{i-}$  [11].

$$E_{i+} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_j \rangle - B \quad (26.3)$$

$$E_{i-} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_j \rangle + B \quad (27.3)$$

### 4.3 خوارزمية متروبوليس :

سنكتشف الآن كيفية كتابة برنامج يتيح لنا حساب مختلف الكميات الترموديناميكية و ذلك من خلال نموذج ايزينغ في بعدين، الخوارزمية المفضلة لحل نموذج ايزينغ هي الطريقة التي اقترحها متروبوليس و من معه سنة 1953، يتم توليد تشكيلات جديدة من تشكيلات سابقة باستعمال احتمال الانتقال [33,32,15] الذي يعتمد على فرق الطاقة بين الحالة الأولية و الحالة النهائية.

و في حالتنا هذه لدينا دالة المعاينة لمونتي كارلو هي احتمال وجود النظام في الحالة  $S$  و تعطى بـ :

$$\mathcal{P}_S = \frac{e^{-(\beta E_S)}}{Z} \quad (28.3)$$

مع الطاقة  $E_S$ ،  $\beta = \frac{1}{K_B T}$  و  $Z$  هو ثابت التنظيم الذي يحدد دالة التوزيع للمجموعة القانونية.

$$Z(\beta) = \sum_S e^{-(\beta E_S)} \quad (29.3)$$

من الصعب حسابها لأننا نحتاج جميع الحالات، في نموذج ايزينغ في بعدين يتم اعطاء عدد التشكيلات بـ  $2^N$  حيث  $N = L \times L$  و  $N$  هو عدد السبينات و لحسن الحظ تأخذ خوارزمية متروبوليس بعين الاعتبار النسب بين الإحتمالات فقط، و لذا لا نحتاج إلى دالة التوزيع على الاطلاق.

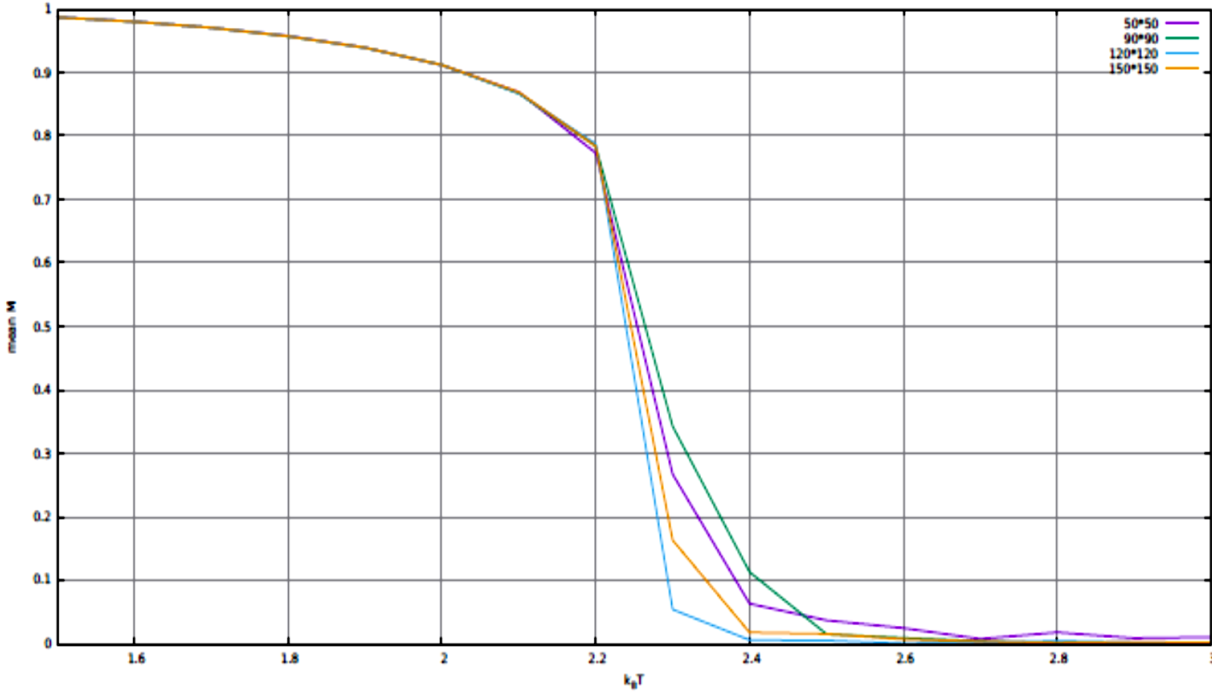
تكون الخوارزمية على الشكل التالي [33,13]:

1. نختار حالة ابتدائية بطاقة  $E_b$  من خلال تشكيلة عشوائية في الشبكة.
2. تغيير التشكيلة الأولية من خلال قلب سبين واحد فقط ثم حساب الطاقة لهذه الحالة الاختبارية  $E_t$ .
3. حساب  $\Delta E = E_t - E_b$  قيم  $\Delta E$  محددة بخمسة لنموذج ايزينغ في بعدين.
4. إذا كانت  $\Delta E \leq 0$  نقبل التشكيلة الجديدة هذا يعني أن الطاقة انخفضت و بذلك نتجه نحو القيمة الدنيا للطاقة عند درجة حرارة معينة، في هذه الحالة ننتقل مباشرة إلى الخطوة السابعة.
5. إذا كانت  $\Delta E > 0$  نحسب  $e^{-(\beta \Delta E)}$ .
6. نقارن  $e^{-(\beta \Delta E)}$  بعدد عشوائي  $r$ .
7. إذا كان  $r \leq e^{-(\beta \Delta E)}$  فإننا نقبل التشكيلة الجديدة أو نبقي على التشكيلة القديمة.
7. تحدث الخطوة التالية مختلف القيم المتوسطة.
8. نكرر الخطوات (2) و (7) من اجل الحصول على تشكيلة جيدة كافية للحالات.
9. في كل مرة تمسح فيها الشبكة فإن هذا يشكل ما يسمى بدورة مونتي كارلو، يمكننا اعتبار كل دورة لمونتي كارلو على انها قياس، في النهاية علينا قسمة مختلف القيم المتوسطة على العدد

الاجمالي للدورات يمكننا اختيار القسمة على عدد السبينات للحصول على مختلف القيم المتوسطة لوحدة السبين على سبيل المثال الطاقة في هذه الحالة تصبح طاقة لوحدة السبين.

### 5.3 مناقشة النتائج العددية:

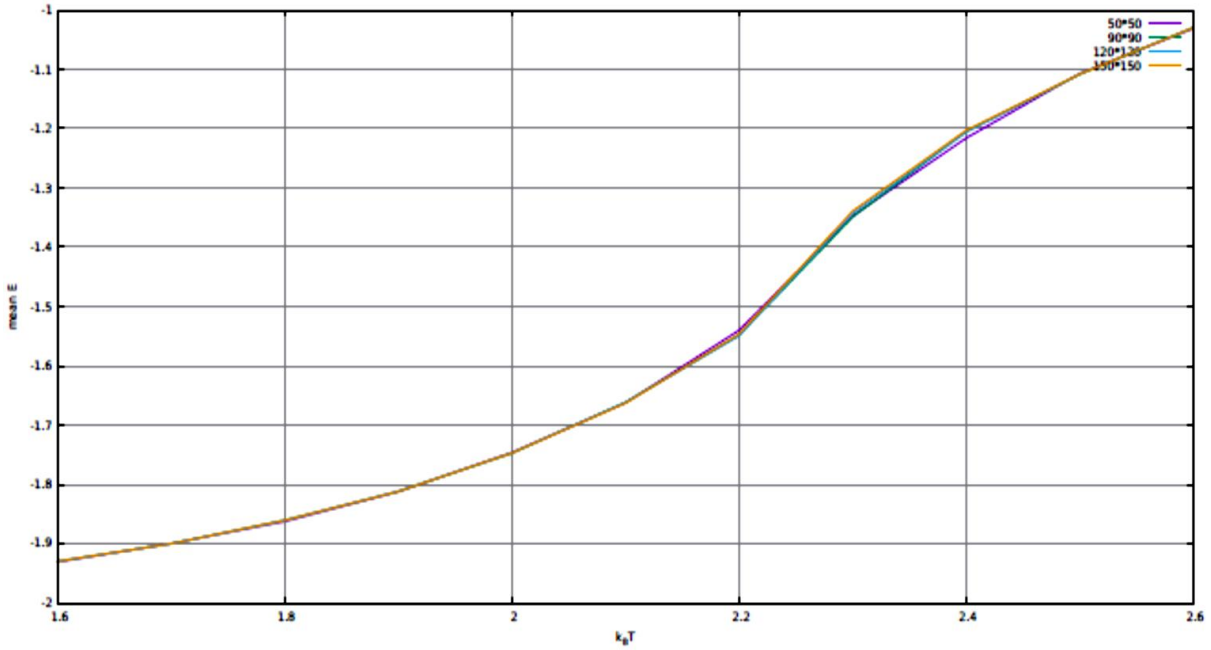
إن النتائج العددية المتحصل عليها كما تبين الأشكال (الشكل:1.3، الشكل:2.3، الشكل:3.3، الشكل:4.3) كانت من أجل ألف دورة مونتي كارلو و متروبوليس لشبكات مختلفة ذات بعدين، و ذلك بإستعمال خطوة حرارية قدرها 0,1  $(\Delta T = 0,1)$ .



الشكل(1.3): منحنى المغنطة

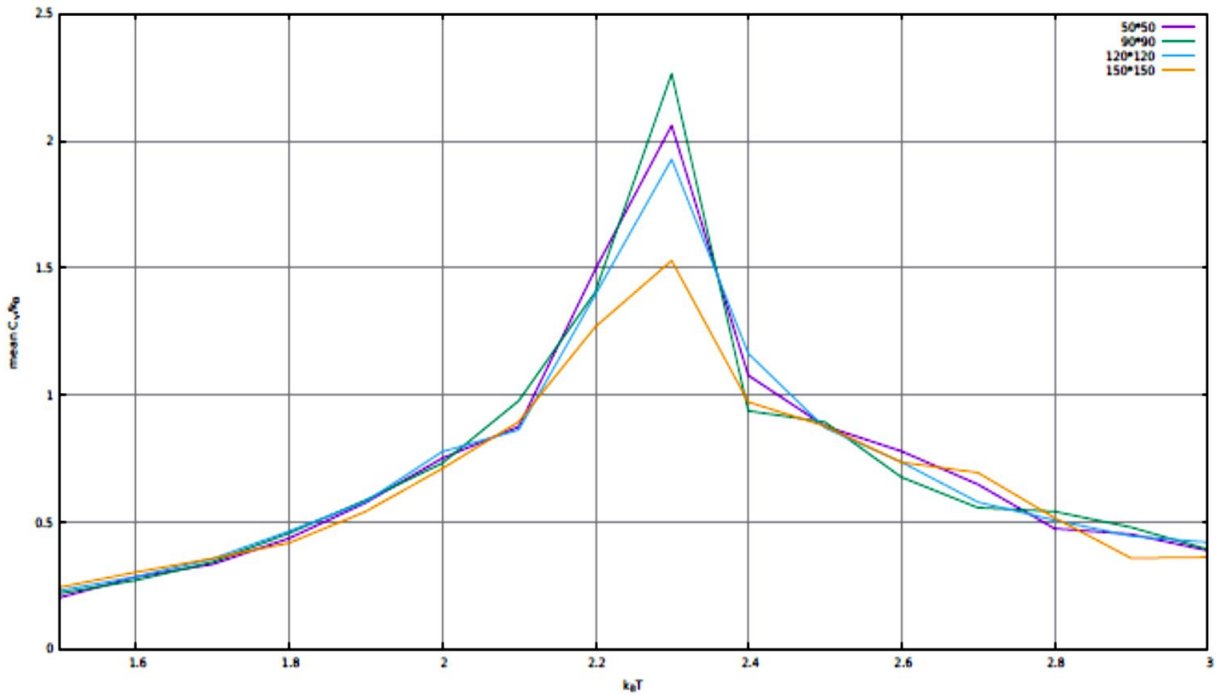
إن ما نريد ملاحظته من خلال منحنى المغنطة هو الانتقال الطوري، الأمر الذي يبدو جليا من خلال النتائج العددية الموضحة من خلال رسم المنحنيات في الشكل(1.3). من خلال الشكل(1.3) نلاحظ انه بزيادة حجم الشبكة نقترّب من المنحنى الأكثر انحدارا و الانتقال من المغنطة الصغيرة إلى المغنطة الأكبر يصبح أكثر حدة(و ذلك في جوار درجة الحرارة المقدره بـ 2,3 و التي هي درجة الحرارة الحرجة)، و هذا هو الدليل على الانتقال الطوري من الدرجة الثانية، أي أننا ننتقل من الحالة التي تكون فيها كل السبينات (أو أغلبها) موجهة في اتجاه واحد معين إلى الحالة التي يكون فيها تكافئ بين السبينات في الاتجاه المعين و الاتجاه المعاكس له.

إن الحالة الاولى و التي تمثل الطور المنتظم عند درجات حرارة منخفضة ذو المغنطة غير المنعدمة و الذي يسمى بالطور الفيرومغناطيسي أما الحالة الثانية و التي تمثل الطور غير المنتظم عند درجات حرارة عالية ذو المغنطة المنعدمة يسمى بالطور البارامغناطيسي.



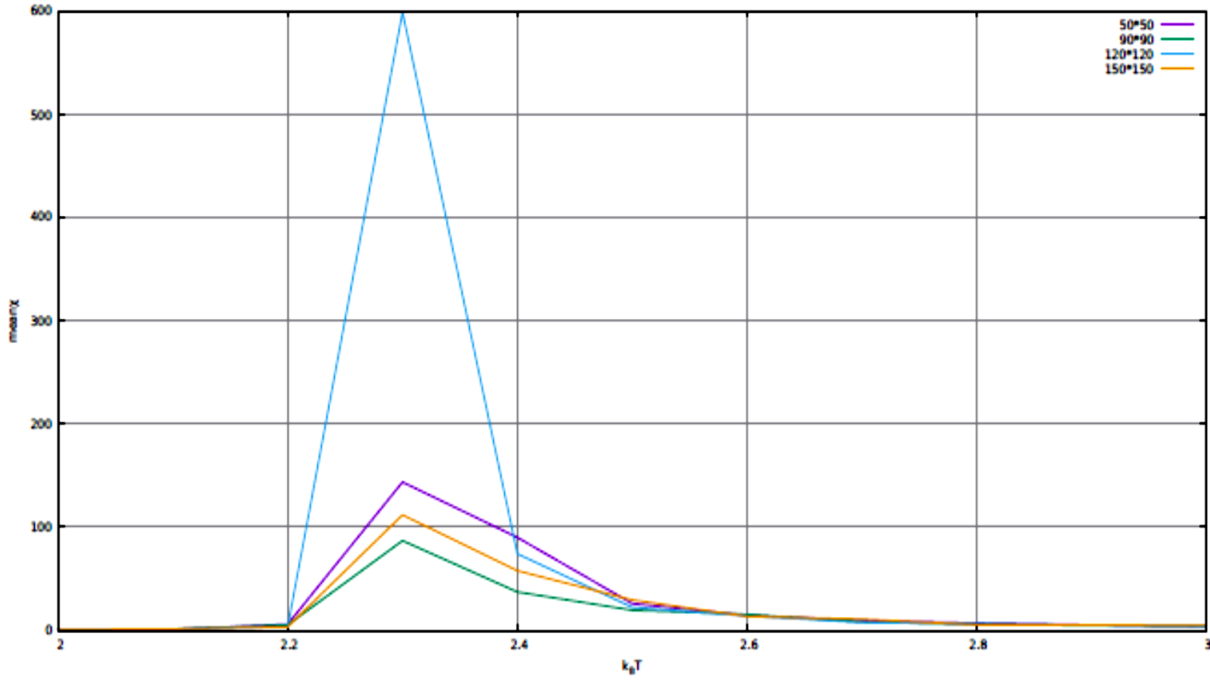
الشكل(2.3): منحنى الطاقة

الشكل(2.3) يوضح أن الطاقة تصل إلى الاستقرار كدالة في حجم الشبكة، كما نلاحظ ان هناك زيادة صغيرة و استمرارية في منحنى الطاقة ما عدا التغير الأكبر نسبيا جوار الحرارة الحرجة  $T_C \approx 2,3$ .



الشكل(3.3): منحنى السعة الحرارية

من خلال الشكل(3.3) نلاحظ أنه بزيادة حجم الشبكة السعة الحرارية تتطور و تزداد الحدة في المنطقة المجاورة للنقطة الحرجة  $T_C \approx 2,3$ .



الشكل (4.3): منحنى الحساسية

إن التصرف المذكور للسعة الحرارية في جوار درجة الحرارة الحرجة  $T_c \approx 2,3$ ، أي أن الحساسية تزداد حدة منحناها عند اقترابها من درجة الحرارة الحرجة.

# الخلاصة العامة

### الخلاصة العامة

تعتبر محاكاة مونتني كارلو و نظرية تقريب الحقل المتوسط أدوات حاسمة في مقارنة الظاهرة الفيرومغناطيسية و الظاهرة الحرجة.

من خلال هذه الدراسة قمنا بتقديم عموميات حول الانتقالات الطورية حيث تم التوصل إلى الفهم الشامل و الأعمق لها، و ذلك من خلال التطرق إلى الخصائص العامة التي تميزها من خلال التعريف بالأدوات الرياضية و المفاهيم الفيزيائية التي تمكننا من ذلك كتعريف وسائط الترتيب و الأسس الحرجة و معرفة مختلف معايير التصنيف و خاصية العالمية التي تحققها هذه الأسس، كما قمنا بدراسة عامة حول الترموديناميك ثم التطرق إلى المجموعة القانونية و حساب بعض الكميات الترموديناميكية انطلاقاً من دالة التوزيع، أخيراً تمت دراسة نموذج ايزينغ ثنائي الأبعاد من خلال كتابة شفرة الفورترون بالاعتماد على خوارزمية متروبوليس و مونتني كارلو و تحصلنا من خلال هذا الحساب العددي على منحنيات الطاقة و المغنطة و الحساسية و السعة الحرارية و التي أثبتنا من خلالها على وجود الانتقال الطوري الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي عند درجة الحرارة الحرجة.

# قائمة المراجع

قائمة المراجع

- [1] D. Tong, " Statistical Physics", Cambridge. U. K, 2012
- [2] M. Heritier, "Mecanique statistique et transitions de phases", D.E.A de physique des solides, 52,53, 1997/1998
- [3] C. Aslangul, "Physique Statistique des Fluides Classiques", Universié de Pierre et Marie CURIE, 98, 2005/2006
- [4] ب. يدري، "الواقع و الزمن و الفيزياء الأساسية"، معهد الفيزياء، جامعة عنابة، 267، 2018
- [5] C. Ngô, H. Ngô, " Physique statistique introduction( 3édition)", Dunod, Paris, 2008
- [6] N.sator, N.pavlof, "Phisique statisfique", Vuibert, 2016
- [7] M. Le Bellac, " Quantum and Statistical Field Theory", Oxford Science Publications, New Yor, 3-12, 1991
- [8] K.Huang, " Statistical mechanics", JOHN WIELEY & SONS, 1987
- [9] N.J.Giordano, H. Nakanishi, "Computational Physics", 2<sup>nd</sup> Edition,Pearson/Prentice Hall,235-244, 2008
- [10] I.Zargoug, "Modél d'Ising dilué",Thèse de doctorat, Université d'Oran des sciences et la technologie(OSTO\_MB), 3,11,36, 2015
- [11] S.Zriouel, "Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone",Thèse de doctorat, 34,36, Université Mohammed V-Rabat, 2016
- [12] K.Huang, " Introduction to Statistical Physics", Taylor & Francis, London and New York , 2002
- [13] Rubin H. Landau, Manuel José Páez and Cristian C. Bordeianu, " Computational Physics: Problem Solving with Computers", 2nd edition, John Wiley and Sons, 169, 2007
- [14] S. Benkihoul, " modele de type-ising ferromagnetique en 2d : etude par simulations monte carlo", Mémoire de Master, Universite mohamed boudiaf - m'sila, 2017
- [15] B. Ydri," Computational Physics ", World Scientific, singapora, 2017

- [16] F. Jędrzejewski, "Modèles Aléatoires et Physique Probabiliste", Springer, 2009
- [17] J. S. Blundell et K. M. Blundell, "Concepts in Thermal Physics", Oxford University Press, 2008
- [18] T. Guénault, "Statistical Physics", Springer, 2007
- [19] M. Kardar, "Statistical Physics of Fields", Cambridge, London, 2007
- [20] N. Schmidt, "étude sur la transition de phase ferromagnétique /paramagnétique de nanoagrégats de MnP", Diplome de Maitrise Es Sciences Appliquées(génie physique) , Université de montréal, 2011
- [21] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, "Thermodynamics and Statistical Mechanics", springer, New York, 1997
- [22] Kittel. C, Introduction to solid state physics, (6th edn). Wiley, New York, 1986
- [23] Wilson. K, "The renormalization group and critical phenomena", Rev. Mod. Phys. 55, 583, 1983. doi:10.1103/RevModPhys.55.583
- [24] ر.ضيف الله، "دراسة عددية لنموذج ايزينغ"، مذكرة ماستر، جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي، 2018
- [25] H.Eugence, "Introduction to phase transitions and critical phenomena", clarendon press, oxford, 1971
- [26] ب.يدري، "الفيزياء الأساسية"، معهد الفيزياء، جامعة عنابة، 2016
- [27] إبراهيم محمود أحمد ناصر، "مبادئ أساسية في الفيزياء الإحصائية"، جامعة الملك فهد للبترول و المعادن، 2008
- [28] M.Kardar, "Statistical Physics of Particles", Cambridge, London, 2007
- [29] Ma. S. K, Statistical mechanics, World Scientific, Singapore, 1985
- [30] R.H.Landau, M.J.Paez, C.C. Bordeianu, "Computational Physics: Problem Solving with Computers", 2nd edition, John Wiley and Sons, 2007
- [31] Paul L.DeVries, "A First Course in Computational Physics", 2nd edition, Jones and Bartlett Publishers , 2010

[32] M. Hjorth-Jensen, " Computational Physics", University of Oslo, 401,410,414, 2011

[33] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, "The Journal of Chemical Physics",1953

## المخلص

تهدف هذه المذكرة إلى حساب بعض الكميات الترموديناميكية كالسعة الحرارية و الحساسية و المغنطة والطاقة لنموذج ايزينغ الذي من خلاله تمكنا من اثبات الانتقال الطوري الفيرومغناطيسي- البارامغناطيسي و الذي هو انتقال طوري من الدرجة الثانية و هو المثال الاكثر شيوعا لمثل هذه الانتقالات الطورية.

إن دراسة نموذج ايزينغ تمت في إطار المجموعة القانونية، من خلال المحاكاة العددية بالاعتماد على مونت كارلو و خوارزمية متروبوليس حيث تم ملاحظة الانتقال الطوري عند درجة حرارة حرجة  $T=2,3$  من أجل خطوة حرارية قدرها 0,1 من خلال منحنيات الكميات الترموديناميكية المتحصل عليها عدديا.

**كلمات مفتاحية:** نموذج ايزينغ، الانتقال الطوري، درجة الحرارة الحرجة، الكميات الترموديناميكية، الانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي.

## Abstract

The goal of this dissertation is to calculate some useful thermodynamical quantities such as Heat capacity, Susceptibility, Magnetization and Energy to the Ising model which is the model that we can prove through it the Ferromagnetic-Paramagnetic transitions, such transitions are a second-order phase transition and considered as most the important example for these phase transitions.

The study of Ising model has been done in the framework of the canonical ensemble through numerical simulations by using a Monte Carlo and Metropolis Algorithm. The phase transition is shown from the curves of the thermodynamical quantities at the critical temperature  $T_c = 2,3$  for temperature step equal to 0,1.

**Keyword:** Ising model, Phase transition, critical temperature, Thermodynamical quantities, Ferromagnetic-Paramagnetic transition.